



TITLE:

1次元量子系にみられる特異な輸送 特性：厳密解からのアプローチ

AUTHOR(S):

堺, 和光

CITATION:

堺, 和光. 1次元量子系にみられる特異な輸送特性：厳密解からのアプローチ. 物性研究 2006, 87(2): 214-266

ISSUE DATE:

2006-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/110684>

RIGHT:

1 次元量子系にみられる特異な輸送特性¹

— 厳密解からのアプローチ —

東京大学大学院 総合文化研究科 堺 和光²

(2006 年 9 月 1 日受理)

無限個の保存量を有する 1 次元量子可積分系では、輸送現象を担うカレントが、系の可積分性に由来する保存量と密接に関連し、それが輸送特性の異常となつてあらわれることがある。スピン $1/2$ の 1 次元 Heisenberg 模型は量子可積分系の典型例であり、一方で、この模型で記述できる物質が数多く作成され、輸送特性や動的性質に関する実験が精力的に行われている。特に、古典的描像では説明できないスピン拡散係数の異常や、スピンが媒介する巨大な熱伝導などの観測例は、量子可積分性にまつわる輸送特性の異常として注目を集めている。本解説では、スピン $1/2$ Heisenberg 鎖の特異な輸送特性に焦点を当て、最近の研究の進展を紹介する。

1 はじめに

物性論において、多くの興味ある発見は、非平衡状態にある現象、なかでも輸送現象に関連してなされてきた。超伝導や量子 Hall 効果等の発見はその典型であり、現在でも物性論における重要な研究対象となっている。本解説は、こうした研究とは趣を異にするが、近年その特異性が明らかにされつつある 1 次元量子系における輸送現象に関するものである。

輸送特性は、電気伝導率や熱伝導率など輸送係数の測定により調べられるが、これらの輸送係数は、系に温度勾配や電磁場など外力を加えたときの応答を通して測定されるもので、その定式化には非平衡統計力学の概念が不可欠になる。言うまでもなく、非平衡統計力学の構築は非常に困難であり、現在にいたるまで一般論となる理論は構築されていない。しかし、輸送現象に関してはいくつかのアプローチが存在し、例えば、Boltzmann 方程式に基づく現象論的な手法は古くから用いられ一定の成功を収めてきた。この方法は量子多体系にも拡張され、相互作用する電子系の輸送係数は、準粒子の分布関数に対する Boltzmann 方程式から計算される [1]。

一般に、相互作用をもつ量子多体系において、量子効果はその次元が小さくなるほど大きくなり、特に 1 次元系では、朝永-Luttinger 流体とよばれる非 Fermi 流体が実現していると考えられている [2]。このような系では、非摂動的な量子効果のため、通常の 3 次元系で有用であった準粒子の散乱描像に基づいた現象論的な手法は困難となり、より微視的な理論が必要となる。

¹本稿は、編集部の方から特にお願いして執筆していただいた記事である。

²E-mail: sakai@gokutan.c.u-tokyo.ac.jp

系に加えられた外力が十分小さいとき、それに対する応答を、線形近似の範囲で記述する理論として線形応答理論があり [3], 相関の有無や次元に関わらず、系の輸送係数は、カレントの熱平衡状態における動的相関関数によって一般的に記述される。これを用いると、伝導率 $\sigma(\omega)$ は、 $\sigma(\omega) = \pi D \delta(\omega) + \sigma^{\text{reg}}(\omega)$ のように、外力の振動数 ω に関して特異な項と正則な項の和で表される。第1項のデルタ関数にかかる重みは Drude 重みと呼ばれ、考えている輸送特性が弾道的か散逸的かを判別する量となる。通常の3次元系では、カレントが保存する場合のみ $D > 0$ となり、散乱等によりカレントが保存しない場合は $D = 0$ となって有限の抵抗が生じる。

ところが1次元量子系では、カレントが相互作用の存在によって非保存となる系でも Drude 重みが有限 ($D > 0$)、すなわち、輸送特性が弾道的になりうるものが、Zotos らの量子可積分系に関する研究によって指摘されている [4, 5]。つまり、カレントが保存しない場合でも、無限個の保存量を有する量子可積分系では、カレントが何らかの保存量と有限のオーバーラップを持ち、そのため Drude 重みが有限になるというのである。この考えを、量子可積分系の典型例であり、低次元量子磁性体を表す模型でもある、1次元スピン 1/2 Heisenberg 模型に当てはめると、系のスピン伝導や熱伝導は弾道的になりその伝導率は発散する [6–11]。この系は、電流が流れない絶縁体であり、また、格子振動(フォノン)は考えていない。すなわち、この理論的観測は、磁気的な励起による弾道的な熱伝導・スピン伝導の存在を示唆する。

特筆すべきは、こうした輸送特性の存在は、理論上のみならず、実際の実験においても報告されていることである。 Sr_2CuO_3 や $\alpha\text{-VO}(\text{PO}_3)_2$ は1方向のみ相互作用が強く、スピン 1/2 の反強磁性 Heisenberg 鎖とみなすことができる。この物質に対する NMR 実験 [12, 13] では、古典論からでは説明できない極めて大きなスピン拡散係数が測定されている。また、 Sr_2CuO_3 と同様、 SrCuO_2 や $\text{BaCu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ もまたスピン 1/2 Heisenberg 鎖とみなすことができるが、最近これらの1次元磁性体に対する熱伝導実験が行われ、フォノンの機構では説明されない巨大な熱伝導率が測定されている [14–17]。この実験事実は、スピノンやマグノンと言った磁気励起が熱を支配的に運ぶとすることによって説明され、磁気励起による(準)弾道的な熱伝導の存在の証拠と考えられる。実際この実験により見積もられるスピノンの平均自由行程は、系のスピン相関の相関長よりもはるかに長い。もちろんこれら現実の物質では、フォノンとの相互作用や不純物の効果によって可積分性は壊されているが、上で述べた準弾道的な振る舞いは、可積分性をもつ弾道的な輸送特性の名残として解釈される [18]。これまで理論上でしか考えられなかった1次元量子可積分系の姿が、これら輸送特性の特異性を通して見え隠れしているのは興味深い。

さて、系の輸送特性の無散逸性を表す有限の Drude 重みの存在は、量子可積分系に限られる話なのであろうか？³ この問題に対して、場の理論や数値計算を用いた解析・議論が活発になされているが [9, 19–34]、現在までのところ一般論は構築されていない。実は、磁気励起による巨大な熱伝導は、スピン 1/2 Heisenberg 鎖のみならず、フラストレートしたスピン鎖 CuGeO_3 [35–39] や梯子型スピン系である $(\text{Sr, Ca, La})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ [40–45] など、多数の低次元磁性物質で観測されている。これらの物質を記述する模型は非可積分であり、従って可積分性のみが Drude 重みを有限

³すべての量子可積分系が有限の Drude 重みを持つことは示されていないが、エルゴード性を有さない可積分性は、Drude 重みが有限となるための十分条件であると考えられる。

にする要素であるとする立場からは、上の実験事実を説明することができない。これらの実験結果の理論的解釈を含め、どのような系が有限の Drude 重みを持ち、あるいはそうでないのか？といった問いに対して明確に答えうる理論の構築は、重要な課題として残されている。

このレビューは、これら興味深い輸送現象を、特にスピン 1/2 Heisenberg XXZ 鎖を中心に可積分系の立場から解説したものである。もちろん、この立場は上にも述べたとおり 1 次元量子系の輸送特性を語るには狭すぎる。この分野を広くカバーしたまとまった解説は、理論面・実験面の両方から出ているのでそれも参照されたい [46]。

この解説は以下の構成をとる。次章では、1 次元量子系の輸送特性に関する一般論を、線形応答理論の枠組みで定式化する。さらに、Drude 重みの下限を与える不等式を導入し、輸送特性が弾道的になる条件を議論する。3 章では、2 章で述べた一般論を、具体的にスピン 1/2 Heisenberg XXZ 模型に適用する。そこでは系の輸送をつかさどるスピン流やエネルギー流 (もしくは熱流) を、微視的な議論に基づいて定式化する。特に重要なことは、系のエネルギー流が保存量となることである。このエネルギー流と保存量の関係について、系の可積分性と結びつけた議論も行う。第 4 章、第 5 章では、XXZ 鎖の Drude 重みを具体的に評価し、弾道的な輸送特性に関して定量的に考察する。最後に、第 6 章では、磁場中の輸送現象について考える。磁場中では、系のスピン反転対称性が破れるため、磁気熱効果と呼ばれる現象が出現する。すなわち、系に温度勾配をかけたとき、その温度勾配に沿って磁場勾配が発生する現象が期待されるが [47–49]、この磁気熱効果のメカニズムを詳しく考察する。なお、これら Drude 重みや磁気熱効果の具体的計算には、Bethe 仮説法を中心とした厳密解の知識が必要となる。その基本的事項は Appendix にまとめてある。

2 1 次元量子系における輸送係数

2.1 線形応答理論

ここでは後の準備のため、1 次元量子スピン系における輸送係数を、線形応答理論の枠組みで定式化しよう [3]。系にスピン流 \mathcal{J}_S と熱流 \mathcal{J}_Q の二つのカレントが許されるとする⁴。実際、これらのカレントは、系に外力として磁場勾配 $-\nabla\phi_s$ 、及び温度勾配 ∇T を付加すれば観測されるだろう。外力が十分小さく、系の応答がその 1 次の項で記述できるとしたとき、カレントと外力の間には現象論的な関係式

$$\begin{pmatrix} \mathcal{J}_S \\ \mathcal{J}_Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{SS}(0) & L_{SQ}(0) \\ L_{QS}(0) & L_{QQ}(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\nabla\phi_s \\ -\nabla T/T \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

が成り立つ。久保公式は、輸送係数 L_{ij} ($\{i, j\} \in \{Q, S\}$) を、平衡状態で定義される「カレントの相関関数 (揺らぎ)」によって与え、それは明示的に

$$L_{ij}(\omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \text{Re} \int_0^\infty dt e^{-i(\omega - i\epsilon)t} \int_0^\beta d\lambda \langle \mathcal{J}_i(-t - i\lambda) \mathcal{J}_j \rangle \quad (2.2)$$

⁴電流が流れない絶縁体を考える。

と表される。ここで、 β は温度の逆数 ($\beta = 1/T$)、 $\langle \dots \rangle$ はサイトあたりの熱力学的平均を意味する。久保公式及び (2.1) 式を用いて、スピン系における輸送係数が系統的に表現される。例えば、 $\mathcal{J}_S = \sigma_S(-\nabla\phi_S)$ で定義されるスピン伝導率 σ_S は、温度勾配がゼロ ($\nabla T = 0$) のときに測定され

$$\sigma_S = \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma_S(\omega), \quad \sigma_S(\omega) := L_{SS}(\omega) \quad (2.3)$$

と書ける。一方、 $\mathcal{J}_Q = \kappa(-\nabla T)$ で定義される熱伝導率 κ は、スピン流が流れない条件 ($\mathcal{J}_S = 0$) のもとで測定される。これと (2.1) 式、及び Onsager の関係式 $L_{SQ}(\omega) = L_{QS}(\omega)$ を用いれば

$$\kappa = \lim_{\omega \rightarrow 0} \kappa(\omega), \quad \kappa(\omega) := \frac{1}{T} \left\{ L_{QQ}(\omega) - \frac{L_{QS}^2(\omega)}{L_{SS}(\omega)} \right\}. \quad (2.4)$$

上の議論で、スピン流 \mathcal{J}_S を電流 \mathcal{J}_c と読み替えると、(2.1) 式の非対角成分に由来する項は、熱力学や統計力学の教科書でおなじみの熱電現象に他ならないことに気づくであろう。すなわち、スピン系では、電子系での熱電効果に対応して「磁気熱効果」なる現象が期待されるのである。直観的に言えば、スピン系の両端に温度勾配を与えると磁場勾配が観測され、あるいは、逆に、系に磁場勾配を与えると温度勾配が観測されるはずである。この効果の大きさを測る量として、「磁氣的」Seebeck 係数 (磁気熱能) を $S = -\nabla\phi_S/\nabla T$ と定義しよう。この磁氣的 Seebeck 係数は、 $\mathcal{J}_S = 0$ のもとで測定されるべきもので、(2.1) 式より次式で与えられる。

$$S := -\frac{\nabla\phi_S}{\nabla T} = \frac{1}{T} \frac{L_{QS}}{L_{SS}}. \quad (2.5)$$

2.2 Drude 重み

久保公式 (2.2) で与えられる輸送係数の性質をもう少し踏み込んで見てみよう。輸送係数 L_{ij} は

$$L_{ij}(\omega) = \pi D_{ij} \delta(\omega) + L_{ij}^{\text{reg}}(\omega) \quad (2.6)$$

のように、ゼロ周波数 ($\omega = 0$) で発散する項 (コヒーレント項) と正則な項 (インコヒーレント項) に分けられる。ここで、 D_{ij} 、 L_{ij}^{reg} はそれぞれ

$$\begin{aligned} D_{ij} &= \beta \sum_{\substack{m,n \\ E_m = E_n}} p_m \langle m | \mathcal{J}_i | n \rangle \langle n | \mathcal{J}_j | m \rangle, \\ L_{ij}^{\text{reg}}(\omega) &= \pi \frac{1 - e^{-\beta\omega}}{\omega} \sum_{\substack{m,n \\ E_m \neq E_n}} p_m \langle m | \mathcal{J}_i | n \rangle \langle n | \mathcal{J}_j | m \rangle \delta(\omega + E_m - E_n) \end{aligned} \quad (2.7)$$

と与えられる。また、 $p_m := \exp(-\beta E_m)/(LZ)$ をサイトあたりの Boltzmann 重率 (L : サイト数, Z : 分配関数), $|n\rangle$ をハミルトニアン \mathcal{H} の固有ベクトル, E_n を対応するエネルギー固有値とする。時間 t に関する部分積分を用いれば、 D_{ij} はまた、

$$D_{ij} = \int_0^\beta \langle \mathcal{J}_i(-i\lambda) \mathcal{J}_j \rangle d\lambda - \sum_{\substack{m,n \\ E_m \neq E_n}} p_n \frac{\langle m | \mathcal{J}_i | n \rangle \langle n | \mathcal{J}_j | m \rangle + \langle n | \mathcal{J}_i | m \rangle \langle m | \mathcal{J}_j | n \rangle}{E_m - E_n} \quad (2.8)$$

と表すこともできる. (2.6) 式を (2.3) 及び (2.4) 式に代入するとスピン伝導率及び熱伝導率は,

$$\sigma_S(\omega) = \pi D_S \delta(\omega) + \sigma_S^{\text{reg}}(\omega), \quad D_S := D_{SS}, \quad (2.9a)$$

$$\kappa(\omega) = \pi D_Q \delta(\omega) + \kappa^{\text{reg}}(\omega), \quad D_Q := \beta \left(D_{QQ} - \frac{D_{QS}^2}{D_{SS}} \right) \quad (2.9b)$$

とコヒーレント項とインコヒーレント項に分けられる. デルタ関数の重み $D_{Q,S}$ は Drude 重みと呼ばれ, 系の輸送が弾道的か否かを判別する量である [50]. 特に電子系を考えた場合, 電気伝導に対する Drude 重み D_C は, 系が金属か絶縁体かを判別する量としてよく知られている. すなわち, $D_C > 0$ であれば系は金属 (完全導体) であり, $D_C = 0$ であれば系は絶縁体である. これに対応して, スピン系では, スピン伝導に対する Drude 重み D_S (以下スピン Drude 重みと呼ぶ) はスピン伝導が弾道的か否かを判別する量となる. すなわち, $D_S > 0$ ならばスピン伝導は弾道的になり, $D_S = 0$ ならば散逸的な振舞いを示す. 同様にして, 熱伝導に関する Drude 重み D_Q (以下熱的 Drude 重みと呼ぶ) は熱伝導が弾道的か散逸的かを判定する量となる.

2.3 保存量と輸送特性

Drude 重みが有限であれば輸送特性は弾道的になるが, 果たしてこれが実現する系とはどのような系であろうか? もちろん, スピン流などのカレントが保存する系であれば輸送特性は弾道的になるが, 逆に弾道的な輸送特性が実現されるのはカレントが保存される系のみであろうか? このことを議論するために等式 [51]

$$D_{ij} = \beta \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\langle \mathcal{J}_i \mathcal{Q}_m \rangle \langle \mathcal{J}_j \mathcal{Q}_m \rangle}{\langle \mathcal{Q}_m^2 \rangle} \quad (2.10)$$

を導入しよう. ここで, $\{\mathcal{Q}_m\}$ は保存量の組, すなわち $[\mathcal{H}, \mathcal{Q}_m] = 0$ を満たす量とし, さらに

$$\langle \mathcal{Q}_m \mathcal{Q}_n \rangle = \langle \mathcal{Q}_m^2 \rangle \delta_{mn} \quad (2.11)$$

のように直交化されているとする⁵. (2.10) 式を示すには, \mathcal{J}_i 及び \mathcal{J}_j をエネルギースペクトルに関する対角部分 $\mathcal{J}^{(0)}$ と非対角部分 $\mathcal{J}^{(1)}$ に

$$\mathcal{J}_{i,j} = \mathcal{J}_{i,j}^{(0)} + \mathcal{J}_{i,j}^{(1)} = \sum_m c_{i,j}^m \mathcal{Q}_m + \mathcal{J}_{i,j}^{(1)}, \quad \begin{cases} \langle m | \mathcal{J}_{i,j}^{(0)} | n \rangle = 0 & \text{for } E_m \neq E_n \\ \langle m | \mathcal{J}_{i,j}^{(1)} | n \rangle = 0 & \text{for } E_m = E_n \end{cases} \quad (2.12)$$

と分解する. この分解を用いれば, (2.7) 式は $D_{ij} = \beta \sum_m c_i^m c_j^m \langle \mathcal{Q}_m^2 \rangle$ となる. ところで, (2.12) 式に \mathcal{Q}_n をかけて, 直交性 (2.11) を用いれば $c_{i,j}^m = \langle \mathcal{J}_{i,j} \mathcal{Q}_m \rangle / \langle \mathcal{Q}_m^2 \rangle$ が得られるが, これを上 D_{ij} に代入すれば (2.10) 式が与えられる.

この (2.10) 式を見れば Drude 重みが保存量と関連していることがわかるであろう. これを, より具体的にスピン Drude 重み $D_S (= D_{SS})$ の場合について議論しよう. この場合 D_S は

$$D_S = \beta \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\langle \mathcal{J}_S \mathcal{Q}_m \rangle^2}{\langle \mathcal{Q}_m^2 \rangle} \geq \beta \frac{\langle \mathcal{J}_S \mathcal{Q}_0 \rangle^2}{\langle \mathcal{Q}_0^2 \rangle} \quad (2.13)$$

⁵このような直交した組は, 例えばシュミットの直交化法を用いれば系統的に構成される.

と不等式 (Mazur 不等式 [52] とよばれる) で表され、 D_S の下限値が定められる。このことは、スピン流 \mathcal{J}_S が保存しなくても、 \mathcal{J}_S と有限のオーバーラップ ($\langle \mathcal{J}_S \mathcal{Q}_0 \rangle > 0$) を持つ適当な保存量 \mathcal{Q}_0 がひとつでも存在する系であれば、 $D_S > 0$ となり、スピン伝導は弾道的になることを意味する。

残念ながら、このような保存量が存在するか否かを判定する一般的な方法は、今のところ発見されていない。しかし、後で詳しく議論するように、あるクラスの量子可積分系ではエネルギー流 \mathcal{J}_E が保存量となることが示され、この \mathcal{J}_E を先ほどの保存量 \mathcal{Q}_0 として選ぶことができる。そうすれば、スピン流が保存しない場合でも、少なくとも有限磁場 $h > 0$ であれば Drude 重みは有限 ($D_S > 0$)、すなわち、スピン伝導が弾道的になることが示される。多くの量子可積分系では、Drude 重みの直接的な計算により、カレントが保存しない場合でも輸送特性が弾道的になることが示されるが、このことは可積分系が無限個の保存量を有することに起因すると考えられる。

3 Heisenberg XXZ 鎖におけるカレントと保存量

3.1 スピン流及び熱流

久保公式 (2.2) に基づいて輸送係数を具体的に計算するためには、それぞれの系に応じてスピン流や熱流などのカレント演算子を定めなければならない。ここでは、具体例として 1 次元格子上で定義されるスピン 1/2 Heisenberg 模型を考え、この系のスピン流と熱流を定義しよう。なお、ここで導出される熱流やスピン流は、一般の 1 次元量子系にも拡張可能である。

スピン 1/2 Heisenberg XXZ 鎖 (以下簡単に XXZ 鎖と呼ぶ) のハミルトニアン \mathcal{H} は

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - h\mathcal{M},$$

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{k=1}^L J \underbrace{\left\{ \sigma_k^+ \sigma_{k+1}^- + \sigma_{k+1}^+ \sigma_k^- + \frac{\Delta}{2} (\sigma_k^z \sigma_{k+1}^z - 1) \right\}}_{h_{kk+1}}, \quad \mathcal{M} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^L \sigma_k^z \quad (3.1)$$

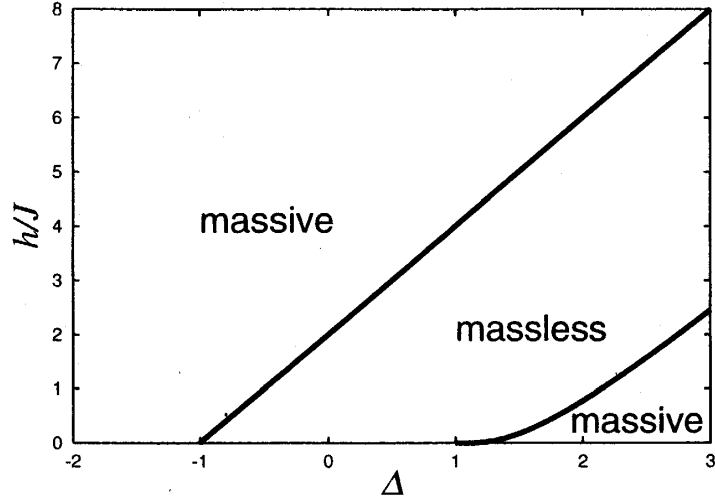
で与えられる。ここで $\sigma_k^\pm = (\sigma_k^x \pm i\sigma_k^y)$ であり、 σ_k^a ($a \in \{x, y, z\}$) は k 番目のサイトに作用する Pauli 行列である。以下、サイト数 L は偶数とし、さらに系に周期境界条件 $\sigma_k^a = \sigma_{k+L}^a$ を課す。交換積分 J 、磁場 h (それぞれ $J > 0$, $h \geq 0$ と仮定する) 及び異方性を表すパラメーター Δ は系の基底状態を決定する (図 3.1)。XXZ 鎖は、無限個の保存量を有する量子可積分系の典型例であり、系の基底状態や素励起、さらに比熱や帯磁率などの熱力学量は Bethe 仮説を用いて厳密に解くことができる [53] (Appendix 参照)。

次に、XXZ 鎖のカレント密度を連続の方程式を用いて定義しよう。まず、ゼロ磁場の場合を考える。サイト k におけるエネルギー流密度 j_k^E 及びスピン流密度 j_k^S はそれぞれ連続の方程式

$$\dot{S}_k^z = -\text{div} j_k^S, \quad \dot{h}_{kk+1} = -\text{div} j_k^E \quad (3.2)$$

に従う。ここで $S_k^z = \sigma_k^z/2$ であり、 div は差分、すなわち $\text{div} j_k = j_{k+1} - j_k$ を表す。この式に $\dot{h}_{kk+1} = i[\mathcal{H}_0, h_{kk+1}]$ と $\dot{S}_k^z = i[\mathcal{H}_0, S_k^z]$ を代入して両辺を比べれば、 j_k^S 及び j_k^E はそれぞれ

$$j_k^E = i[h_{k-1k}, h_{kk+1}], \quad j_k^S = i[h_{k-1k}, S_k^z] \quad (3.3)$$


 図 3.1: $J > 0$, $h \geq 0$ に対する Heisenberg XXZ 鎖 (3.1) の相図.

と定義できる. これにより, 全スピン流 $\mathcal{J}_S := \sum j_k^S$ と全エネルギー流 $\mathcal{J}_E := \sum j_k^E$ は

$$\mathcal{J}_S = iJ \sum_{k=1}^L (\sigma_k^+ \sigma_{k+1}^- - \sigma_{k+1}^+ \sigma_k^-), \quad (3.4a)$$

$$\mathcal{J}_E = -iJ^2 \sum_{k=1}^L \{ \sigma_k^z (\sigma_{k-1}^+ \sigma_{k+1}^- - \sigma_{k+1}^+ \sigma_{k-1}^-) - \Delta (\sigma_{k-1}^z + \sigma_{k+2}^z) (\sigma_k^+ \sigma_{k+1}^- - \sigma_{k+1}^+ \sigma_k^-) \} \quad (3.4b)$$

とあらわに書き下せる. ところで, この系の全磁化 $\mathcal{M} = \sum S_k^z$ は保存量であるが, これは上式の全スピン流 \mathcal{J}_S が well-defined であるために必要な条件である.

ゼロ磁場 ($h = 0$) の場合, エネルギー流 \mathcal{J}_E をそのまま熱流 \mathcal{J}_Q とみなす, つまり $\mathcal{J}_Q = \mathcal{J}_E$ とすることができる. これに対して有限磁場 ($h > 0$) の場合は熱流として

$$\mathcal{J}_Q = \mathcal{J}_E - h \mathcal{J}_S \quad (3.5)$$

を用いるべきであることは, 連続の方程式 $i[\mathcal{H}, h_{kk+1} - hS_k^z] = -\text{div} j_k^Q$ からわかるであろう⁶.

ところで, 熱流をエネルギー流とみなす場合 ($\mathcal{J}_Q = \mathcal{J}_E$) と, (3.5) 式のようにスピン流まで含めて考える場合 ($\mathcal{J}_Q = \mathcal{J}_E - h \mathcal{J}_S$) との違いは, 熱伝導率の値そのものに対しては影響を及ぼさない. この事実は, 両式を直接 (2.4) 式に代入すれば確かめられるし, そもそも $\mathcal{J}_Q = \kappa(-\nabla T)$ で定義される熱伝導率は, スピン流が流れない状況のもとで定義されることから明らかであろう. しかし, 熱流とスピン流が複合的に関連する磁気熱効果などを考える場合, 熱流として (3.5) 式で与えられるものを考えなければならない.

さて, 微視的な立場から, スピン流及び熱流が定義されたわけであるが, 実際に伝導率を久保公式によって求めるためには, それらの動的な相関関数を計算しなければならない. 一般的に相

⁶エントロピーの変化 dS が, 内部エネルギー U 及び磁化 M の変化として, $TdS = dU - h dM$ と表される熱力学関係式に対応していることに注意.

関関数の計算は、厳密に解ける模型であっても極めて難しい。ところが、今のように輸送特性を考えると、XXZ 鎖に代表される多くの量子可積分系では、エネルギー流が非自明な保存量のひとつで書けてしまう。実際に (3.4b) 式で与えられるエネルギー流が $[\mathcal{H}, \mathcal{J}_E] = 0$ を満たすことは、スピン演算子の交換関係を用いて直接的に確かめることができる (系の可積分性に基づくより深い議論は次節を参照)。この事実は、(3.5) 式の熱流が時間変化しない永久カレントを含み、系の熱伝導が弾道的になることを意味する。このとき熱的 Drude 重み (2.9b) は

$$D_Q = \beta^2 \langle \mathcal{J}_E^2 \rangle - \beta^3 \frac{\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle^2}{D_S} \quad (3.6)$$

と書き下せる。ところで、スピンの反転変換 $S_k^z \rightarrow -S_k^z$, $\sigma_k^\pm \rightarrow \sigma_k^\mp$ に対して、エネルギー流及びスピン流は $\mathcal{J}_E \rightarrow \mathcal{J}_E$, $\mathcal{J}_S \rightarrow -\mathcal{J}_S$ と変換されるから、系にスピン反転対称性が存在するゼロ磁場 ($h = 0$) の場合には $\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle = 0$ となる。この場合には $L_{SQ} = 0$ となって磁気熱効果は現れない。このとき上の熱的 Drude 重みはさらに簡単化され

$$D_Q = \beta^2 \langle \mathcal{J}_E^2 \rangle \quad (3.7)$$

となり \mathcal{J}_E の自己相関で表される。対照的に有限磁場 $h > 0$ の場合、系にスピン反転対称性が存在しないため、 $\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle > 0$ となり磁気熱効果が出現する。このとき、Mazur 不等式 (2.13) で $\mathcal{Q}_0 = \mathcal{J}_E$ と選べば、

$$D_S \geq \beta \frac{\langle \mathcal{J}_S \mathcal{J}_E \rangle^2}{\langle \mathcal{J}_E^2 \rangle} > 0 \quad (3.8)$$

が示される。ここで重要なことは、エネルギー流の場合とは対照的に、この系のスピン流は $\Delta = 0$ の XY 模型の場合を除いて保存しないことである。つまり、

$$[\mathcal{H}, \mathcal{J}_S] \neq 0 \quad \text{for } \Delta \neq 0 \quad (3.9)$$

であるが、このようにスピン流が保存しない非自明な場合でも、スピン Drude 重みが有限、すなわちスピン伝導が弾道的になるという事実は興味深い。

3.2 エネルギー流と保存量

XXZ 鎖は無限個の保存量を有する可積分系のひとつであるが、このこととエネルギー流の保存性とは関連しているのであろうか？この節では、可積分性と保存するエネルギー流について、より踏み込んで議論しよう。その準備として、まず XXZ 鎖と対応する 2 次元古典系に関して述べる。

一般に、 d 次元量子系は $d+1$ 次元古典系に対応することが知られているが [54]、XXZ 鎖に関連付けられる 2 次元古典系は、以下で説明する 6 頂点 (6-vertex) 模型である。6 頂点模型とは、2 次元の周期的格子 ($L' \times L$) 上の各格子点の周りの 4 つのエッジに、+ 及び - の 2 つの状態を取る状態変数が配置された模型であり (図 3.2)、ノンゼロとなる統計重率 $\mathcal{R}_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(u; v)$ が

$$\mathcal{R}_{\pm\pm}^{\pm\pm}(u; v) = 1, \quad \mathcal{R}_{\pm\mp}^{\pm\mp}(u; v) = \frac{[u-v]}{[u-v+2]}, \quad \mathcal{R}_{\mp\pm}^{\mp\pm}(u; v) = \frac{[2]}{[u-v+2]}, \quad [v] := \frac{\sin \frac{\gamma}{2} v}{\sin \frac{\gamma}{2}} \quad (3.10)$$

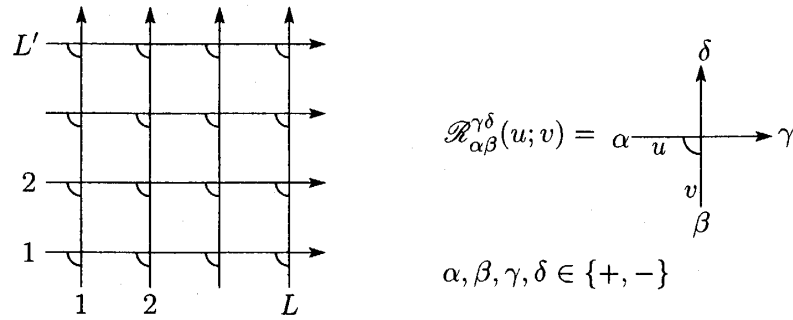


図 3.2: 6 頂点模型. $L' \times L$ の周期的な 2 次元格子上的各格子点の周りの 4 つのエッジに + と - の状態変数が配置され, その状態変数が格子点から見て反時計回りに $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ のときの統計重率を $\mathcal{R}_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(u; v)$ とする. このときノンゼロとなる統計重率は (3.10) 式の 6 つの場合で与えられる.

の 6 つの場合で与えられる模型である (他の 10 個の統計重率はゼロ, すなわち $\alpha + \beta \neq \gamma + \delta$ に対して $R_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(v) = 0$). $u, v \in \mathbb{C}$ はスペクトルパラメータと呼ばれ, 特に, 6 頂点模型の場合には上式のように $u - v$ と差の形で依存する. 従って, 以下混乱の無い限り

$$\mathcal{R}(u - v) := \mathcal{R}(u; v) \quad (3.11)$$

という記法を用いる. さて, V を $v_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ 及び $v_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ を基底とした 2 次元のベクトル空間 $V = \mathbb{C}v_+ \oplus \mathbb{C}v_-$, また, $\mathcal{R}(v)$ を (3.10) 式を行列要素として持つ行列 (\mathcal{R} 行列; $\mathcal{R}(v) \in \text{End}(V \otimes V)$)

$$R(v)(v_\alpha \otimes v_\beta) = \sum_{\gamma, \delta} R_{\alpha\beta}^{\gamma\delta}(v) v_\gamma \otimes v_\delta$$

としよう. また, この $\mathcal{R}(v)$ (\mathcal{R} 行列と呼ぶ) は Pauli 行列を用いてあらわに

$$\mathcal{R}_{ij}(v) = \frac{[2]}{[v+2]} (\sigma_i^+ \sigma_j^- + \sigma_j^+ \sigma_i^-) + \frac{[v]}{[v+2]} \frac{1 - \sigma_i^z \sigma_j^z}{2} + \frac{1 + \sigma_i^z \sigma_j^z}{2} \quad (3.12)$$

と書ける⁷. この \mathcal{R} 行列は, (3.1) 式で $\Delta = \cos \gamma$ と置いたときの局所ハミルトニアン h_{kk+1} と

$$\tilde{\mathcal{R}}'_{kk+1}(0) = \frac{h_{kk+1}}{A}, \quad \tilde{\mathcal{R}}(v) := \mathcal{R}(0)\mathcal{R}(v), \quad A := \frac{2J \sin \gamma}{\gamma} \quad (3.13)$$

なる関係で結ばれているのである. さらに \mathcal{R} 行列が Yang-Baxter 方程式

$$\mathcal{R}_{23}(v)\mathcal{R}_{13}(u)\mathcal{R}_{12}(u-v) = \mathcal{R}_{12}(u-v)\mathcal{R}_{13}(u)\mathcal{R}_{23}(v);$$

$$(3.14)$$

⁷ここで, $\mathcal{R}(v)$ の添字 i, j は, $\mathcal{R}(v)$ が i 番目の空間 V_i 及び j 番目の空間 V_j に作用する行列 ($R_{ij}(v) = \text{End}(V_i \otimes V_j)$) であることを明白にするために用いた.

を満足することは、直接 (3.12) 式を代入することによって示される。この Yang-Baxter 方程式は量子可積分系の鍵ともいえる重要な方程式として知られる。すなわち、Yang-Baxter 方程式の解 $\mathcal{R}(u; v)$ ごとに、 $\partial_v \check{R}(v, 0)|_{v=0}$ を量子系の局所ハミルトニアンとみなすことにより、量子可積分系を系統的に構成することができるのである。この Yang-Baxter 方程式によって、

$$T(v) := \text{Tr}_a \mathcal{T}_a(v)$$

$$\mathcal{T}_a(v) := \mathcal{R}_{aL}(v) \mathcal{R}_{aL-1}(v) \cdots \mathcal{R}_{a1}(v) = a \begin{array}{c} \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ v \quad v \quad v \quad v \quad v \\ | \quad | \quad | \quad | \quad | \\ 1 \quad 2 \quad \quad L-1 \quad L \end{array} \quad (3.15)$$

で定義される転送行列 $T(v) \in \text{End}(V^{\otimes L} \otimes V^{\otimes L})$ は、異なるスペクトルパラメーターに関して可換、

$$[T(u), T(v)] = 0 \quad (3.16)$$

となる。このことは以下のようにして示される。まず、(3.15) 式の中で定義された、空間 $V_a \otimes V^{\otimes L}$ に作用するモノドロミー行列と呼ばれる行列 $\mathcal{T}_a(v) \in \text{End}(V^{\otimes L+1} \otimes V^{\otimes L+1})$ を考えよう。量子空間⁸ (quantum space) $V^{\otimes L}$ 上でモノドロミー行列の積 $\mathcal{T}_{a_2}(v) \mathcal{T}_{a_1}(u)$ を作り、さらに、補助空間 $V_{a_1} \otimes V_{a_2}$ 上で \mathcal{R} 行列 $\mathcal{R}_{a_1 a_2}(u - v)$ を作用させた

$$\mathcal{T}_{a_2}(v) \mathcal{T}_{a_1}(u) \mathcal{R}_{a_1 a_2}(u - v) = \begin{array}{c} a_1 \\ \swarrow \quad \searrow \\ u-v \\ \swarrow \quad \searrow \\ a_2 \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ | \quad | \quad | \quad | \\ v \quad v \quad v \quad v \\ | \quad | \quad | \quad | \\ u \quad u \quad u \quad u \end{array}$$

を見てみよう。この式に Yang-Baxter 方程式 (3.14) を次々に適用すると

$$\begin{array}{c} a_1 \\ \swarrow \quad \searrow \\ u-v \\ \swarrow \quad \searrow \\ a_2 \end{array} \begin{array}{c} \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ | \quad | \quad | \quad | \\ v \quad v \quad v \quad v \\ | \quad | \quad | \quad | \\ u \quad u \quad u \quad u \end{array} = \begin{array}{c} a_1 \\ \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ | \quad | \quad | \quad | \\ u \quad u \quad u \quad u \\ | \quad | \quad | \quad | \\ v \quad v \quad v \quad v \end{array} \begin{array}{c} \swarrow \quad \searrow \\ u-v \\ \swarrow \quad \searrow \end{array}$$

$$\mathcal{T}_{a_2}(v) \mathcal{T}_{a_1}(u) \mathcal{R}_{a_1 a_2}(u - v) = \mathcal{R}_{a_1 a_2}(u - v) \mathcal{T}_{a_1}(u) \mathcal{T}_{a_2}(v) \quad (3.17)$$

が示される。この関係式と \mathcal{R} 行列のユニタリ関係式

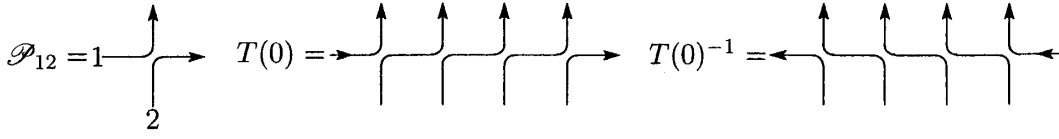
$$\mathcal{R}_{21}(-v) \mathcal{R}_{12}(v) = \mathcal{R}_{12}(-v) \mathcal{R}_{21}(v) = \mathbf{1} \quad (3.18)$$

を用いれば、

$$T(v)T(u) = \text{Tr}_{a_1, a_2} [\mathcal{T}_{a_2}(v) \mathcal{T}_{a_1}(u)]$$

$$= \text{Tr}_{a_1, a_2} [\mathcal{R}_{a_1 a_2}(u - v) \mathcal{T}_{a_1}(u) \mathcal{T}_{a_2}(v) \mathcal{R}_{a_1 a_2}^{-1}(u - v)]$$

⁸ $V^{\otimes L}$ が、対応する量子系である XXZ 鎖 (3.1) の作用する空間と同一であることからこのように呼ぶ。これに対して、 $\mathcal{T}_a(v)$ が作用する残りの空間 V_a を補助空間 (auxiliary space) と呼ぶ。


 図 3.3: 左から, 置換演算子 $\mathcal{P}_{12} = \mathcal{R}_{12}(0)$, 右シフト演算子, 左シフト演算子.

$$\begin{aligned}
 &= \text{Tr}_{a_1, a_2} [\mathcal{R}_{a_1 a_2}^{-1}(u-v) \mathcal{R}_{a_1 a_2}(u-v) \mathcal{T}_{a_1}(u) \mathcal{T}_{a_2}(v)] \\
 &= \text{Tr}_{a_1, a_2} [\mathcal{T}_{a_1}(u) \mathcal{T}_{a_2}(v)] \\
 &= T(u)T(v)
 \end{aligned}$$

となって可換性 (3.16) が示される. ここで, 上式の 1 行目から 2 行目の変形では (3.17) 式を, 2 行目から 3 行目へはトレースの中では演算子を巡回的に置換できることを, そして 3 行目から 4 行目では \mathcal{R} 行列のユニタリー関係式 (3.18) を適用した.

ところで, $\mathcal{R}_{12}(0) = \mathcal{P}_{12}$ (\mathcal{P}_{12} : 置換演算子) であるから, 転送行列 $T(v)$ のスペクトルパラメータを $v=0$ としたとき, $T(0)$, $T(0)^{-1}$ はそれぞれ, 右シフト演算子及び左シフト演算子となる (図 3.3). これと, 可換性 (3.16) から, $T(v)$ の対数微分が \mathcal{H}_0 (3.1) に他ならないこと, つまり,

$$\mathcal{H}_0 = A \partial_v \ln T(v)|_{v=0}, \quad A = \frac{2J \sin \gamma}{\gamma} \quad (3.19)$$

と表されることが,

$$\begin{aligned}
 T(0)^{-1}T'(0) &= \sum_{k=1}^L \text{Diagram} \\
 &= \sum_{k=1}^L \mathcal{P}_{k+1k} \mathcal{R}'_{kk+1}(0) = \sum_{k=1}^L \check{\mathcal{R}}'_{kk+1}(0) = \frac{1}{A} \mathcal{H}_0
 \end{aligned}$$

となることから示される. ここで $\mathcal{P}_{k+1k} = \mathcal{P}_{kk+1}$ であり, さらに最後の等式で (3.13) 式を用いた.

さて, 6 頂点模型の転送行列が (3.19) 式の形で XXZ 鎖のハミルトニアンを含むことがわかった. このことと可換性 (3.16) から, 転送行列の高次の対数微分は, XXZ 鎖の保存量となることが示される. 言い換えれば, 無限個の包含的な保存量の組 $\{\mathcal{J}^{(n)}\}$, $[\mathcal{J}^{(n)}, \mathcal{J}^{(m)}] = 0$ が

$$\mathcal{J}^{(n)} = (-i)^{n-1} (A \partial_v)^n \ln T(v) \Big|_{v=0} \quad (3.20)$$

のように $\ln T(v)$ を母関数として生成されるのである. ここで, $n=1$ の場合がハミルトニアン \mathcal{H}_0 に対応していることに注意してほしい. また, $n=0$ の場合, $\mathcal{J}^{(0)}$ は運動量演算子に相当する (Appendix A). 次に, $n=2$ の場合を考えよう. (3.20) 式より

$$\mathcal{J}^{(2)} = -iA^2 \sum_{k=1}^L \{ \check{\mathcal{R}}''_{kk+1}(0) - \check{\mathcal{R}}'^2_{kk+1}(0) - [\check{\mathcal{R}}'_{k-1k}(0), \check{\mathcal{R}}'_{kk+1}(0)] \}$$

となるが、ユニタリー関係式 (3.18) より最初の 2 項はキャンセルする。さらに、(3.13) 及び (3.3) 式を用いれば、

$$\mathcal{J}^{(2)} = i \sum_{k=1}^L [h_{k-1k}, h_{kk+1}] = \sum_{k=1}^L j_k^E = \mathcal{J}_E \quad (3.21)$$

となり、 $\mathcal{J}^{(2)}$ がエネルギー流 (3.4b) に他ならないことがわかる。つまり、 \mathcal{J}_E は、XXZ 鎖の可積分性に内在する非自明な保存量のひとつで表されるのである。以上のことは、(3.14) 式と (3.19) 式から導かれる関係式 $T'(v) = -1/A \sum_{k=1}^L [T(v), kh_{kk+1}]$ を用いると $\mathcal{J}^{(n+1)} = [\mathcal{J}^{(n)}, i \sum_{k=1}^L kh_{kk+1}]$ なる関係式が成立していることからわかる。ここで k は L を法とする整数 ($k+L \equiv k$) である。

ところで、エネルギー流が保存量となることは何も XXZ 鎖に限ったことではない。前にも述べたように、一般に Yang-Baxter 方程式の解 \mathcal{R} ごとに量子可積分系が (3.13) 式を通じて構成されるが、このときに \mathcal{R} 行列が (3.11) 式で表される差法性を有し、さらにユニタリー関係式 (3.18) を満たすならばエネルギー流が保存量となるのである。 \mathcal{R} 行列の差法性及びユニタリー関係式は、いま述べた XXZ 鎖の他、超対称 $t-J$ 模型など多くの量子可積分系が有する性質である。逆に、 \mathcal{R} 行列に差法性がないような特殊な量子可積分系のエネルギー流は一般には保存量とはならない。このような模型の代表例が 1 次元 Hubbard 模型である。しかし、エネルギー流が保存しない Hubbard 模型のような場合でも、2 章で議論したように、無限個の保存量を有する量子可積分系では、カレントと有限のオーバーラップを持つ保存量が存在すると考えられ、このため輸送特性に散逸は見られず、弾道的な振舞いを示すと考えられる。

4 XXZ 鎖の熱伝導～ゼロ磁場の場合～

前章では、XXZ 鎖のエネルギー流は保存量となり、そのため熱伝導が発散することを見た。特にゼロ磁場の場合は、磁気熱効果が現れないため、熱伝導率 (2.9b) はコヒーレント項のみとなる ($\kappa^{\text{reg}}(\omega) = 0$)。このとき熱的 Drude 重みはエネルギー流の相関関数として (3.7) 式で与えられる。この章では、ゼロ磁場での熱的 Drude 重みを、Bethe 仮説法を用いて解析する。この解析を通して、系の熱伝導がスピノンやマグノンといった磁気励起によって記述されることがわかるであろう。

さて、(3.7) 式で与えられるゼロ磁場 ($h = 0$) での熱的 Drude 重み D_Q を得るために、エネルギー流 \mathcal{J}_E を摂動として加えた系を考える。 D_Q は、分配関数 $Z^{(2)}(1, \lambda_1) = \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \lambda_1 \mathcal{J}_E)}$ (cf. (B.13)) を用いると次式で与えられる。

$$D_Q = \beta^2 \langle \mathcal{J}_E^2 \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \partial_{\lambda_1}^2 \ln Z^{(2)}(1, \lambda_1) \Big|_{\lambda_1=0}.$$

ここで、 $\langle \mathcal{J}_E \rangle = 0$ 、 $\mathcal{J}_E = \mathcal{J}^{(2)}$ を用いた。 $Z^{(2)}(1, \lambda_1)$ は (B.16) 式で表され、従って D_Q は

$$D_Q = \oint_C a_1(x+i) \partial_{\lambda_1}^2 \ln(1 + \eta(x+i)^{-1}) \Big|_{\lambda_0=1, \lambda_1=0} dx \quad (4.1)$$

と書ける。ここで、 $a_1(v)$ は (A.12) で与えられ ($n=1$ としたもの)、パラメータ γ は XXZ 鎖 (3.1) の異方性パラメータと $\Delta = \cos \gamma$ と関連付けられる。また、積分路 C は実軸を取り囲み、その虚部

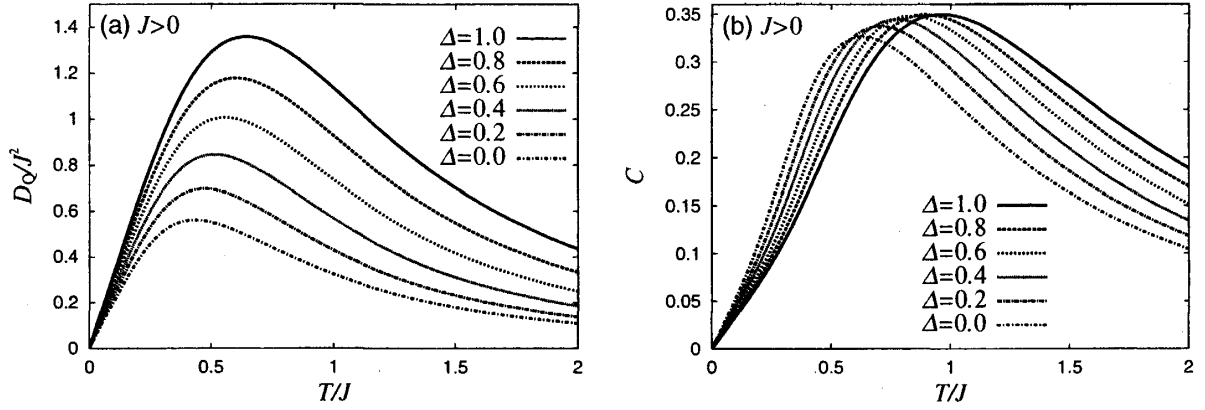


図 4.1: (a): 反強磁性的かつ無質量領域 ($J > 0$, $0 \leq \Delta \leq 1$) での熱的 Drude 重み D_Q の温度依存性. (b): 同じ領域での比熱 C の温度依存性.

が $[-1, 1]$ の範囲内にあるように取る (図 7.3). 関数 $\eta(v)$ は非線形積分方程式 (B.15) 式で $\lambda_0 = 1$, $n = 2$ と置いたもの, すなわち

$$\ln \eta(v) = -2\pi\beta A(1 + \lambda_1 A \partial_v) a_1(v) + \oint_C a_2(v - x - i) \ln(1 + \eta(x + i)^{-1}) dx; \quad A = \frac{2J \sin \gamma}{\gamma} \quad (4.2)$$

の解として与えられる. 現在のところ, この非線形積分方程式の解析解は, XY 鎖 ($\Delta = \cos \frac{\pi}{2} = 0$, $a_2(v) = 0$) や低温・高温極限など特殊な場合を除いて得られていない. しかし, 特筆すべきは上式はただひとつの未知関数に関する積分方程式であり, 厳密対角化などの手法では不可能な熱力学的極限における有限温度物理量を容易に解析することができる.

4.1 無質量領域 ($|\Delta| \leq 1$)

ここでは, 系の基底状態と励起状態の間にギャップが存在しない, 無質量領域 ($|\Delta| \leq 1$) における熱的 Drude 重み D_Q の振舞いを調べよう. 特に, 以下では (i) 無質量かつ反強磁性的領域 $0 < \Delta \leq 1$, (ii) 低温極限及び (iii) 高温極限, (iv) XY 鎖の 4 つの場合に関して議論しよう.

4.1.1 反強磁性的領域 ($0 < \Delta \leq 1$)

異方性パラメーターが反強磁性的な領域 ($0 < \Delta \leq 1$) にあるときの D_Q の温度依存性を図 4.1 に図示した. また比較のため,

$$C = \beta^2 \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \partial_\beta^2 \ln Z^{(n)}(1, 0) = \beta^2 \oint_C a_1(x + i) \partial_\beta^2 \ln(1 + \eta(x + i)^{-1}) \Big|_{\lambda_0=1, \lambda_1=0} dx \quad (4.3)$$

で与えられる比熱 C の温度依存性も図 4.1 に示した. 次節でも詳しく述べるが, D_Q は低温で $D_Q \sim T$ (for $T \ll 1$) と温度 T に比例し (cf. (4.9)), 高温では $D_Q \sim 1/T^2$ (for $T \gg 1$) と温度の 2 乗の逆数に比例する (cf. (4.19)).

熱的 Drude 重み D_Q は、ある温度で極大値を持つが、そのときの温度は粗く見積もって比熱のその約半分である。また C と比較して、この領域の D_Q は異方性に強く依存している。また、相互作用を表す Δ が大きくなるにつれて D_Q も大きくなる。これは次節でも見るように、無質量領域においてはスピノンが熱伝導に寄与するが、 $|\Delta| \leq 1$ の範囲では、 Δ が大きくなるに従いスピノンの励起速度も上昇するためである。

4.1.2 低温極限 $T \ll 1$

低温極限 $T \ll 1$ における D_Q の振る舞いを議論しよう。ここでの解析で便利になるように、(4.2) 式及び (4.1) 式を Fourier 変換を用いて書き換える (Appendix B 参照)。すなわち、 $\alpha(v) := 1/\eta(v+2i)$, $\bar{\alpha}(v) := \eta(v)$ とすれば (4.2) 式は (B.19) 式で $n=2$, $h=0$ と置いたものに書き換えられる。この $\alpha(v)$, $\bar{\alpha}(v)$ を用いれば、分配関数 $Z^{(2)}(\lambda_0, \lambda_1)$ は、(B.20) 式で与えられる量子転送行列の最大固有値を用いて $\lim_{L \rightarrow \infty} (\ln Z^{(2)})/L = \ln \Lambda_Q^{\max}(0)$ と表される。さて、(B.19) 式中 (以下 $\lambda_0=1$, $n=2$, $h=0$ とする) の driving term ($\epsilon(v)$ を含む項) は $v \rightarrow \pm\infty$ で

$$-\beta(1 + \lambda_1 A \partial_v) \epsilon(v) \xrightarrow{v \rightarrow \pm\infty} -\beta\pi A \left(1 \mp \lambda_1 \frac{\pi A}{2}\right) e^{\mp \frac{\pi}{2}v} \quad (4.4)$$

となる。(4.4) = -1 となる点を \mathcal{K}_{\pm} とすれば、 $\beta \gg 1$ のとき $\alpha(v)$ 及び $\bar{\alpha}(v)$ はこの点において

$$\begin{aligned} \alpha(v) &\ll 1, \quad \bar{\alpha}(v) \ll 1 \quad \text{for} \quad -\mathcal{K}_- < v < \mathcal{K}_+, \\ \alpha(v) &\simeq 1, \quad \bar{\alpha}(v) \simeq 1 \quad \text{for} \quad v < -\mathcal{K}_-, \mathcal{K}_+ < v \end{aligned}$$

とクロスオーバーする。この \mathcal{K}_{\pm} はあらわに

$$\mathcal{K}_{\pm} = \frac{2}{\pi} \ln \left\{ \beta\pi A \left(1 \mp \lambda_1 \frac{\pi A}{2}\right) \right\}$$

と書ける。 $v = \pm\mathcal{K}_{\pm}$ 近傍の振舞いを調べるため、 $\alpha(v)$ 及び $\bar{\alpha}(v)$ に関して、以下のスケーリング関数 $a_{\pm}(v)$, $\bar{a}_{\pm}(v)$ を導入する。

$$a_{\pm}(v) = \alpha\left(\pm \frac{2}{\pi}v \pm \mathcal{K}_{\pm}\right), \quad \bar{a}_{\pm}(v) = \bar{\alpha}\left(\pm \frac{2}{\pi}v \pm \mathcal{K}_{\pm}\right), \quad a_{\pm}(-\infty) = \bar{a}_{\pm}(-\infty) = 0$$

また、 $\mathfrak{A}(v)$ 及び $\bar{\mathfrak{A}}(v)$ に関しても、同様に $A_{\pm} = 1 + a_{\pm}$, $\bar{A}_{\pm} = 1 + \bar{a}_{\pm}$ とする。このスケーリング関数は (B.19) 式より低温極限 $\beta \rightarrow \infty$ で

$$\begin{aligned} \ln a_{\pm}(v) &= -e^{-v} + \kappa_1 * \ln A_{\pm}(v) - \kappa_{2\pm} * \ln \bar{A}_{\pm}(v), \\ \ln \bar{a}_{\pm}(v) &= -e^{-v} + \kappa_1 * \ln \bar{A}_{\pm}(v) - \kappa_{2\mp} * \ln A_{\pm}(v), \\ \kappa_1(v) &= \frac{2}{\pi} \kappa\left(\frac{2v}{\pi}\right), \quad \kappa_{2\pm}(v) = \frac{2}{\pi} \kappa\left(\frac{2v}{\pi} \pm 2i\right). \end{aligned} \quad (4.5)$$

を満たす。この極限において、分配関数 $Z^{(2)}$ (cf. (B.20)) は

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln Z^{(2)}(1, \lambda_1) &= \beta\mathcal{E}(0) + \frac{1}{\beta\pi A (1 - \lambda_1 \frac{\pi A}{2})} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-v} (\ln A_+(v) + \ln \bar{A}_+(v)) dv \\ &\quad + \frac{1}{\beta\pi A (1 + \lambda_1 \frac{\pi A}{2})} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-v} (\ln A_-(v) + \ln \bar{A}_-(v)) dv. \end{aligned} \quad (4.6)$$

と書くことができる. 上式の右辺は次のようにして具体的に計算される. (4.5) 式において, 第1式及び第2式を v に関して微分し, そのあと第1式の両辺に $\ln A_{\pm}(v)$, 第2式の両辺に $\ln \bar{A}_{\pm}(v)$ をかけ (複合同順), 結果の2つの式の両辺を足し合わせたものを (A) とする. 次に (4.5) 式の第1式に $[\ln A_{\pm}(v)]'$ を第2式に $[\ln \bar{A}_{\pm}(v)]'$ をかけ, 結果を足し合わせたものを (B) とする. 最後に (A) から (B) を辺々差し引いて v に関して積分すると結局

$$D_{\pm} = 2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-v} [\ln A_{\pm}(v) + \ln \bar{A}_{\pm}(v)] dv, \quad (4.7)$$

が得られる. ここで

$$\begin{aligned} D_{\pm} &= \int_{a_{\pm}(-\infty)}^{a_{\pm}(\infty)} \left(\frac{\ln(1+a)}{a} - \frac{\ln a}{1+a} \right) da + \int_{\bar{a}_{\pm}(-\infty)}^{\bar{a}_{\pm}(\infty)} \left(\frac{\ln(1+\bar{a})}{\bar{a}} - \frac{\ln \bar{a}}{1+\bar{a}} \right) d\bar{a} \\ &= 2\mathcal{L} \left(\frac{a_{\pm}(\infty)}{1+a_{\pm}(\infty)} \right) + 2\mathcal{L} \left(\frac{\bar{a}_{\pm}(\infty)}{1+\bar{a}_{\pm}(\infty)} \right) - 2\mathcal{L} \left(\frac{a_{\pm}(-\infty)}{1+a_{\pm}(-\infty)} \right) - 2\mathcal{L} \left(\frac{\bar{a}_{\pm}(-\infty)}{1+\bar{a}_{\pm}(-\infty)} \right), \end{aligned}$$

また, $\mathcal{L}(v)$ は Rogers のダイログ関数であり,

$$\mathcal{L}(v) := -\frac{1}{2} \int_0^v \left(\frac{\ln(1-x)}{x} + \frac{\ln x}{1-x} \right) dx.$$

(4.7) 式を (4.6) 式に代入し, 漸近値 $a_{\pm}(\infty) = \bar{a}_{\pm}(\infty) = 1$, $a_{\pm}(-\infty) = \bar{a}_{\pm}(-\infty) = 0$ を用いれば

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln Z^{(2)}(1, \lambda_1) = \frac{1}{6\beta A} \left\{ \frac{1}{1 + \lambda_1 \frac{\pi A}{2}} + \frac{1}{1 - \lambda_1 \frac{\pi A}{2}} \right\} \quad (4.8)$$

が得られる. この式の導出において, 恒等式 $\mathcal{L}(v) + \mathcal{L}(1-v) = \pi^2/6$ を用いた. 従って (4.1) 式で与えられる熱的 Drude 重み D_Q は, 低温極限において

$$D_Q = \frac{\pi v_s}{3} T \quad \text{for } T \ll 1 \quad (4.9)$$

と温度に比例する. ここで v_s は (ゼロ磁場での) スピノンの励起速度であり (A.26) 式で表される. この, 低温における D_Q の振舞いは共形場理論を援用して導出することもでき [24, 26], 連続極限が朝永-Luttinger 流体で記述される系に普遍的な性質である⁹. 以上の議論から, 異方性相互作用が $-1 \leq \Delta = \cos \gamma \leq 1$ にある無質量 XXZ 鎖ではスピノンが (特に低温で) 支配的に熱を運び, しかもその熱伝導は弾道的になると結論付けられる.

ここで低温における D_Q と比熱 C の関係について見てみよう. 比熱は (4.3) 式で与えられ, (4.8) 式より, よく知られた低温比熱の普遍的な振舞い $C = \pi T/(3v_s)$ ($T \ll 1$) [55] が再現される. これと, 熱的 Drude 重みの低温での振舞い (4.9) から,

$$D_Q = C v_s^2 \quad \text{for } T \ll 1 \quad (4.10)$$

なる関係が成立する. 実は, この関係式は次のように現象論を用いて導出することもできる. これまで述べたように, XXZ 鎖は無限個の保存量を有する可積分系であり, エネルギー流はその保

⁹一般的に, ゼロ磁場において, 熱的 Drude 重みは, セントラルチャージ c を用いて $D_Q = c\pi v_s/3$ [26] で与えられる. 一方, 低温比熱は $C = c\pi T/(3v_s)$ [55] で与えられる.

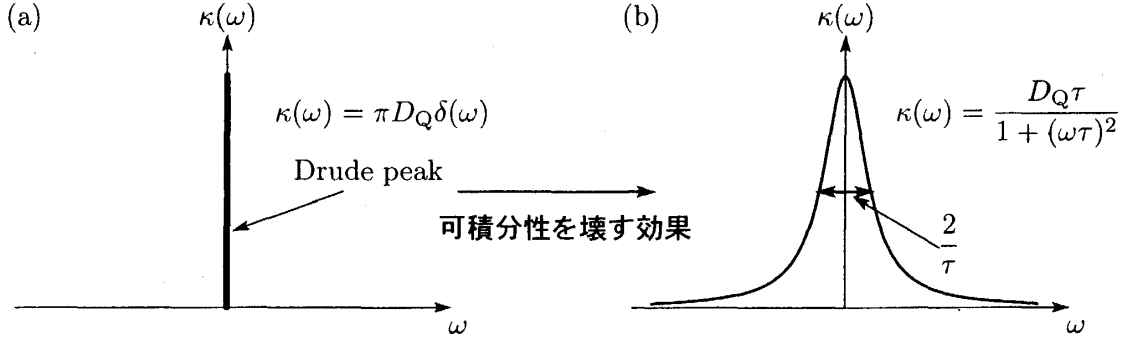


図 4.2: 熱伝導率 $\kappa(\omega)$ の振舞いを模式的に表したもの. (a): XXZ 鎖 (可積分系) における熱伝導率. エネルギー流 \mathcal{J}_E が保存量となるため熱伝導率は $\kappa(\omega) = D_Q\delta(\omega)$ となりゼロ周波数 $\omega = 0$ で発散する. ゼロ磁場 $h = 0$ のとき, 有限周波数 $\omega \neq 0$ における成分はゼロ ($\kappa^{\text{reg}}(\omega) = 0$) となる (cf. (2.9b)). (b): 現実のスピンの鎖物質での熱伝導率. 現実の系では不純物等の存在が可積分性を壊す役割を果たす. このとき, デルタ関数のピークは押し広げられ, 有限の緩和時間 τ を持つ Lorentz 曲線 (Drude 公式) で記述されると期待される. 可積分性を壊す効果が十分に小さいとき, ゼロ周波数 $\omega = 0$ でのピークは $\kappa = D_Q\tau$ で表される.

存量のひとつで表される. 従って, 熱的 Drude 重み D_Q は有限 ($D_Q > 0$) であり, 熱伝導率はゼロ周波数 $\omega = 0$ で (2.9b) 式のように発散する. ところが, 現実の系では, 不純物等の存在など可積分性を壊す効果が必ず存在し, デルタ関数で表されるピークは押し広げられ熱伝導率は有限になる (図 4.2). この可積分性を壊す効果が十分小さいならば, $\kappa(\omega)$ は図 4.2(b) のように, Lorentz 曲線で表され, その面積は Drude 重み D_Q と等しくなるであろう. すなわち

$$\kappa(\omega) = \frac{D_Q\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (4.11)$$

となることが期待される. ここで τ は緩和時間であり, 不純物等が存在しないクリーンな系 (可積分系) で $\tau \rightarrow \infty$ となる. これにより, 現実の系の熱伝導率 $\kappa = \lim_{\omega \rightarrow 0} \kappa(\omega)$ は熱的 Drude 重み D_Q と緩和時間 τ の積

$$\kappa = D_Q\tau \quad (4.12)$$

で表されるであろう. ところで, 現象論的な議論 [56] を用いれば熱伝導率 κ と比熱 C との間には

$$\kappa = Cv_s^2\tau \quad (4.13)$$

なる関係が期待される. 従って, (4.12) 式及び (4.13) 式の両式から τ を消去すると, D_Q と C の間には (4.10) 式が成立する. この議論により熱的 Drude 重み D_Q は, (4.12) 式を通して現実の物質の熱伝導率と密接に関連していることがわかる. また (4.12) 式を用いることによって, スピノンの平均自由行程など物理的に興味ある量を見積もることもできる [16].

最後に, 熱伝導率 κ とスピン伝導率 σ_S の関係について述べておく. 次章で述べるように絶対零度では σ_S は (5.15) 式で与えられる. これと低温での D_Q の振舞い (4.9) から κ と σ_S の比は

$$\frac{\kappa}{\sigma_S} = \frac{2\pi(\pi - \gamma)}{3}T, \quad (T \rightarrow 0), \quad (4.14)$$

と書ける。これは、電子系での電気伝導と熱伝導との比を表す Wiedemann-Franz の関係式の、スピン系に対する類似であり、相互作用が $\Delta = 0$ ($\gamma = \pi/2$) の場合の XY 鎖 (電子系での自由フェルミオンに相当) では、いわゆる Wiedemann-Franz 則 $\kappa/\sigma_S = LT$ を満たす ($L = \pi^2/3$: Lorenz 数)。しかし、相互作用が有限の場合、(4.14) 式のように L は相互作用に依存して連続的に変化する。

4.1.3 高温極限 $T \gg 1$

ここで、熱的 Drude 重みの高温 ($\beta = 1/T \ll 1$) での振舞いを見よう。恒等式

$$\begin{aligned}\partial_\beta \ln \eta(v) &= -(1 + \eta(v)) \partial_\beta \ln(1 + \eta(v)^{-1}) \\ \partial_\beta^2 \ln \eta(v) &= -(1 + \eta(v)) \partial_\beta^2 \ln(1 + \eta(v)^{-1}) + \eta(1 + \eta(v)) (\partial_\beta \ln(1 + \eta(v)^{-1}))^2\end{aligned}$$

及び、 $\beta = 0, \lambda_1 = 0$ のとき $\eta(v) = 1$ となることを用いれば、 $\beta \ll 1$ のとき、(4.2) 式を β で微分したものは、

$$\begin{aligned}\partial_\beta \ln(1 + \eta(v)^{-1}) &= \pi A a_1(v) - \frac{1}{2} \oint_C a_2(v - x - i) \partial_\beta \ln(1 + \eta(x + i)^{-1}) dx \\ \partial_\beta^2 \ln(1 + \eta(v)^{-1}) &= (\partial_\beta \ln(1 + \eta(v)^{-1}))^2 - \frac{1}{2} \oint_C a_2(v - x - i) \partial_\beta^2 \ln(1 + \eta(x + i)^{-1}) dx\end{aligned}\quad (4.15)$$

と線形化される。上式を用いれば、(4.3) 式で与えられる比熱 C は

$$C = \frac{\beta^2}{\pi A} \oint_C (\partial_\beta \ln(1 + \eta(x + i)^{-1}))^3 dx\quad (4.16)$$

と書ける。(4.15) 式は逐次的に解く事ができ、第一式より

$$\partial_\beta \ln(1 + \eta(v)^{-1}) = \pi A \left[a_1(v) - \frac{1}{2} a_2(v - i) \right]\quad (4.17)$$

となり、これを (4.16) 式に代入すれば

$$C = \frac{J^2}{2} \left(1 + \frac{1}{2} \cos^2 \gamma \right) \frac{1}{T^2} = \frac{J^2}{2} \left(1 + \frac{\Delta^2}{2} \right) \frac{1}{T^2}$$

が得られる。同様に D_Q に関しても $\lambda_1 \ll 1, \beta = 0$ のときに成立する

$$\begin{aligned}\partial_{\lambda_1} \ln(1 + \eta(v)^{-1}) &= \pi A^2 \partial_v a_1(v) - \frac{1}{2} \oint_C a_2(v - x - i) \partial_{\lambda_1} \ln(1 + \eta(x + i)^{-1}) dx \\ \partial_{\lambda_1}^2 \ln(1 + \eta(v)^{-1}) &= (\partial_{\lambda_1} \ln(1 + \eta(v)^{-1}))^2 - \frac{1}{2} \oint_C a_2(v - x - i) \partial_{\lambda_1}^2 \ln(1 + \eta(x + i)^{-1}) dx\end{aligned}\quad (4.18)$$

を考えれば、(4.1) 式は

$$D_Q = \frac{\beta^2}{\pi A} \oint_C \partial_\beta \ln(1 + \eta(x + i)^{-1}) (\partial_{\lambda_1} \ln(1 + \eta(x + i)^{-1}))^2 dx$$

と表される。これに (4.17) 及び、(4.18) 式を解いて得られる

$$\partial_{\lambda_1} \ln(1 + \eta(v)^{-1}) = \pi A^2 \partial_v \left[a_1(v) - \frac{1}{2} a_2(v - i) \right]$$

を代入すれば、最終的に

$$D_Q = \frac{J^4(1 + 2 \cos^2 \gamma)}{2T^2} = \frac{J^4(1 + 2\Delta^2)}{2T^2}\quad (4.19)$$

が得られ、熱的 Drude 重みは高温で温度の逆数の 2 乗に比例する。

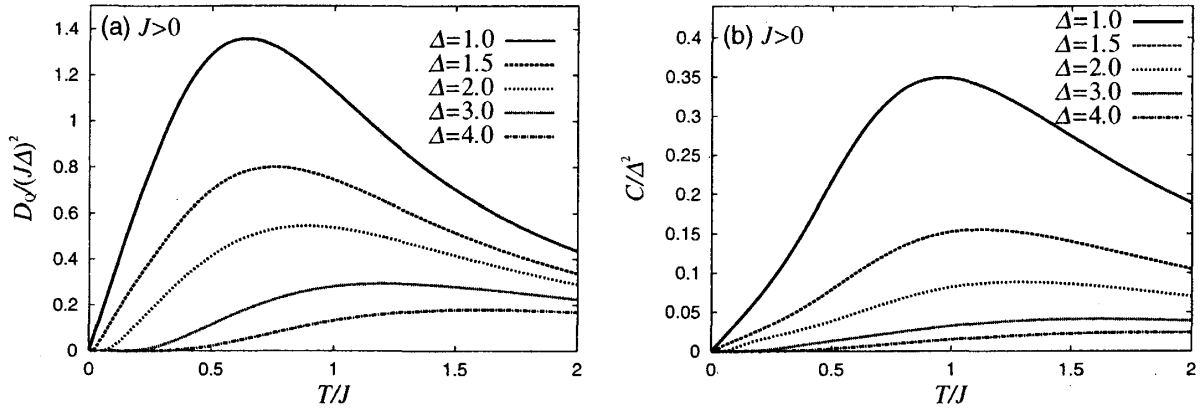


図 4.3: $J > 0, \Delta > 1$ における熱的 Drude 重み D_Q (a) と比熱 C (b) の温度依存性.

4.1.4 XY 鎖 ($\Delta = 0$)

XY 鎖 ($\Delta = 0; \gamma = \pi/2$) の場合, $a_2(v) = 0$ となり, (4.2) 式の解で与えられる関数 $\eta(v)$ は

$$\eta(v) = -8\beta J \left(1 + \lambda_1 \frac{4J}{\pi} \partial_v \right) \frac{1}{4 \cosh \frac{\pi}{2} v}$$

とあらわに与えられる. C を四隅が $-\infty - i, \infty - i, \infty + i, -\infty + i$ で与えられる長方形上を反時計回りに回る経路とし, さらに $1/\cosh(\pi v/2) \rightarrow \cos p$ と変数変換すれば

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln Z^{(2)}(1, \lambda_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \ln \{ 1 + \exp(-2\beta J \cos p + 2\beta \lambda_1 J^2 \sin 2p) \} dp$$

と書け, (4.1) 式より熱的 Drude 重みは

$$D_Q = \frac{\beta^2}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{J^4 \sin^2 2p}{\cosh^2(\beta J \cos p)} dk \quad (4.20)$$

と与えられる. これは Jordan-Wigner 変換を適用し, XY 鎖をスピンレスフェルミオン系に写像し, その上で Fourier 変換を用いて解いた場合と一致する [49].

この D_Q の温度依存性は, $0 < \Delta \leq 1$ の場合とともに図 4.1 に図示してある.

4.2 有質量領域 ($|\Delta| > 1$)

異方性パラメータ Δ が $|\Delta| > 1$ にあるときの有質量領域での熱伝導について議論しよう. (3.1) 式で与えられるハミルトニアン固有値は, 変換 $(J, \Delta) \rightarrow (-J, -\Delta)$ に対して不変であるので, 以下, $\Delta = \cosh \gamma$ において $\Delta > 1$ の領域で考えよう. このとき $J > 0$ 及び $J < 0$ はそれぞれ反強磁性及び強磁性的なモデルに対応する. 熱的 Drude 重み D_Q は, 無質量領域の (4.1) 及び (4.2) 式において $\gamma \rightarrow i\gamma$ としたもので表すことができる.

図 4.3 に反強磁性領域 $J > 0$ における D_Q の温度依存性を, 図 4.4 に, 強磁性領域 $J < 0$ での D_Q の温度依存性を示した. また, 比較のためにそれぞれの領域での比熱 C の温度依存性も示した. 次節

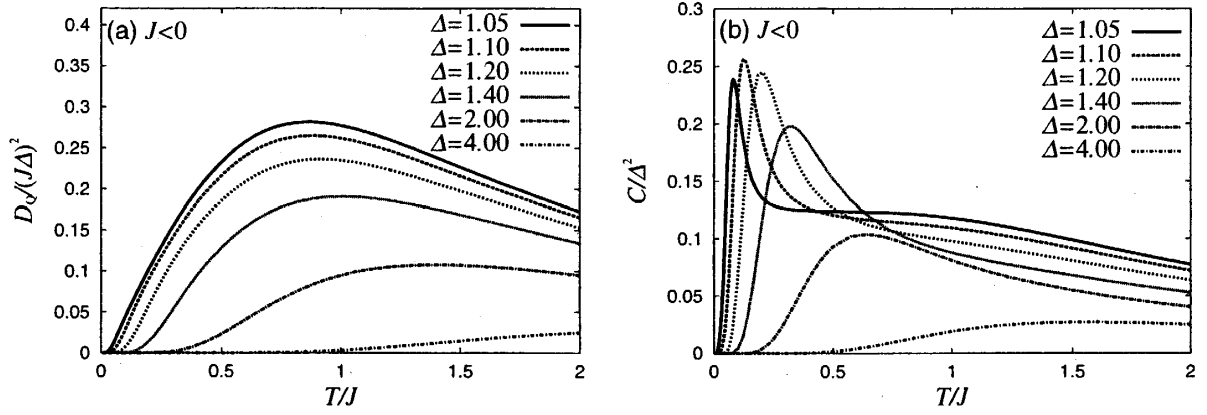


図 4.4: $J < 0, \Delta > 1$ における熱的 Drude 重み D_Q (a) と比熱 C (b) の温度依存性.

でも説明するが、有質量領域では励起ギャップの存在により、低温 ($T \ll 1$) で $D_Q \sim \exp(-\delta/T)/\sqrt{T}$ のように振舞う。ここで δ は $J > 0$ の場合、スピノンの励起ギャップ、 $J < 0$ の場合はマグノンの励起ギャップに相当する (cf. (4.22), (4.26)). ギャップが存在するにも関わらず、熱的効果によって有限温度 ($T > 0$) では $D_Q > 0$ 、すなわち熱伝導は弾道的になる。一方、高温では無質量領域と同じく $D_Q \sim 1/T^2$ と振舞う。 D_Q はある温度 T_p にて極大値をとるが、この T_p は相互作用 Δ が大きくなるに従って高温側へシフトする。これは、 Δ が大きくなるにつれて励起ギャップも広がるためである。特に Ising 極限 (古典極限) $\Delta \rightarrow \infty$ では、 J を固定した状況で考えると、 T_p は温度無限大にシフトし、一方、 $J\Delta$ を固定した状況では、ピークの高さがゼロとなり、いずれの場合も $D_Q \rightarrow 0$ となって弾道的な熱伝導は消失する。

4.2.1 低温極限 $T \ll 1$

(i) 反強磁性領域 ($\Delta > 1, J > 0$)

有質量領域における D_Q の低温での振舞いを定量的に議論しよう。最初に、系が反強磁性領域 ($\Delta > 1, J > 0$) にある場合を考える。まず、低温での解析に便利のように、 $b(v) := 1/\eta(v + 2i)$, $\bar{b}(v) := \eta(v)$ と置いて、(4.2) 式 ($\gamma \rightarrow i\gamma$ とする) を b と \bar{b} に関する方程式に書き換えると (B.22) 式が得られる。ただし、 $\lambda_0 = 1$, $h = 0$ とする (以下同様)。分配関数 $Z^{(n)}(1, \lambda_1)$ は (B.23) 式で表される Λ_Q^{\max} を用いて、 $\lim_{L \rightarrow \infty} (\ln Z^{(n)})/L = \ln \Lambda_Q^{\max}(0)$ と表される。

さて、低温極限 $\beta \gg 1$ のもと、 $b(v)$, $\bar{b}(v)$ は

$$b(v) = \bar{b}(v) = \exp[-\beta(1 + \lambda_1(\tilde{A}\partial_v)^{n-1})\epsilon_{af}(v)]$$

で表され、次のオーダーの項は上の主要項よりも指数関数的に小さい。従って

$$\langle \mathcal{J}^{(n)2} \rangle - \langle \mathcal{J}^{(n)} \rangle^2 = \frac{1}{\pi \tilde{A}} \int_{-\pi/\gamma}^{\pi/\gamma} \epsilon_{af}(x) \{(\tilde{A}\partial_x)^{n-1} \epsilon_{af}(x)\}^2 e^{-\beta \epsilon_{af}(x)} dx$$

となる。これを鞍点 y 法を使って評価すると、

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{J}^{(n)2} \rangle - \langle \mathcal{J}^{(n)} \rangle^2 &= \frac{2(-1)^{n-1}(2J \sinh \gamma)^{\frac{4n-1}{2}} e^{\frac{-2J\alpha_0 \sinh \gamma}{T}}}{\sqrt{-2\pi\alpha_2}} \\ &\times \left\{ \alpha_0 \alpha_{n-1}^2 T^{\frac{1}{2}} + \frac{\alpha_2 \alpha_{n-1}^2 + 2\alpha_0(\alpha_n^2 + \alpha_{n-1}\alpha_{n+1})}{4J\alpha_2 \sinh \gamma} T^{\frac{3}{2}} + O(T^{\frac{5}{2}}) \right\} \end{aligned} \quad (4.21)$$

を得る。ここで α_n は $\alpha_n := \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-1)^k k^n / (2 \cosh k\gamma)$ で定義される。(4.21) 式で $n = 2$ と置いて β^2 をかけたものが、 D_Q であるから ($\langle \mathcal{J}_E \rangle = \langle J^{(2)} \rangle = 0$ に注意), 結局, 低温では

$$D_Q = \frac{-2(2J \sinh \gamma)^{\frac{5}{2}} \alpha_0 \alpha_2}{\sqrt{-2\pi\alpha_2}} e^{\frac{-2J\alpha_0 \sinh \gamma}{T}} \left\{ T^{-\frac{1}{2}} + O\left(T^{\frac{1}{2}}\right) \right\} \quad (4.22)$$

のように振舞う。ここで $\alpha_{2m-1} = 0$ ($m \in \mathbb{Z}_{\geq 1}$) を用いた。重要なことは (4.22) 式に現れる指数 $-2J\alpha_0 \sinh \gamma =: \delta_s$ は 1 スピノンの励起ギャップである¹⁰[53]。従ってこの領域での熱伝導は、(特に低温において) スピノンが支配的に熱を運んでいると考えることができる。比熱 C も同様に、

$$C = \frac{2(2J \sinh \gamma)^{\frac{3}{2}} \alpha_0^3}{\sqrt{-2\pi\alpha_2}} e^{\frac{-2J\alpha_0 \sinh \gamma}{T}} \left\{ T^{-\frac{3}{2}} + \frac{3}{4J\alpha_0 \sinh \gamma} T^{-\frac{1}{2}} + O\left(T^{\frac{1}{2}}\right) \right\}. \quad (4.23)$$

のように、スピノンが (低温で) 支配的に比熱に寄与する。従って、比熱と Drude 重みの比

$$\frac{D_Q}{C} = \frac{-2J\alpha_2 \sinh \gamma}{\alpha_0^2} T = v_s \quad \text{for } T \ll 1$$

で与えられるスピノンの速度は、質量ギャップのため $T \rightarrow 0$ においてゼロになる。しかし、有限温度では熱的效果のため $D_Q > 0$ となり熱伝導は弾道的になる。

(ii) 強磁性領域 ($\Delta > 1, J < 0$)

次に、有質量かつ強磁性的な領域 ($\Delta > 1, J < 0$) について考察しよう。この場合、(B.22) 式で $J < 0$ としたものに他ならないが、 $b(v)$ や $\bar{b}(v)$ は低温で指数関数的に大きくなるため扱いにくい。従って、Appendix B にあるように、 $c(v) := 1/b(v)$, $\bar{c}(v) := 1/\bar{b}(v)$ と置いて議論しよう。Fourier 変換を用いて (B.22) 式を $c(v), \bar{c}(v)$ に関して表したものが (B.25) 式である ($h = 0, \lambda_0 = 1$ とする)。このとき分配関数 $Z^{(n)}(\lambda_0, \lambda_1)$ は、 $\Lambda_Q^{\max}(0)$ (B.26) を用いて $\lim_{L \rightarrow \infty} (\ln Z^{(n)})/L = \ln \Lambda_Q^{\max}(0)$ と表される。 $T \ll 1$ のときに (B.25) 式を逐次的に解くと、 $c(v)$ 及び $\bar{c}(v)$ は

$$\begin{aligned} c(v) &= g(v) + \int_{-\frac{\pi}{\gamma}}^{\frac{\pi}{\gamma}} \kappa_f(v-x) e^{g(x)} dx - \int_{-\frac{\pi}{\gamma}}^{\frac{\pi}{\gamma}} \kappa_f(v-x+i(2-\delta)) e^{\bar{g}(x+\delta i)} dx \\ \bar{c}(v) &= \bar{g}(v) + \int_{-\frac{\pi}{\gamma}}^{\frac{\pi}{\gamma}} \kappa_f(v-x) e^{\bar{g}(x)} dx - \int_{-\frac{\pi}{\gamma}}^{\frac{\pi}{\gamma}} \kappa_f(v-x-i(2-\delta)) e^{g(x-\delta i)} dx \end{aligned} \quad (4.24)$$

となる。ここで δ は微小な正数とし、 $g(v)$ 及び $\bar{g}(v)$ はそれぞれ

$$g(v) := \beta(1 + \lambda_1(\tilde{A}\partial_v)^{n-1})\epsilon_f(v), \quad \bar{g}(v) := \beta(1 + \lambda_1(\tilde{A}\partial_v)^{n-1})\bar{\epsilon}_f(v)$$

¹⁰ スピノンは必ずペアで現れ、実際のエネルギーギャップは 2 スピノン励起 $2\delta_s$ を単位として表される。これに対して、自由エネルギーや比熱 C (4.23) の指数は 1 スピノンギャップ δ_s を単位として表されることに注意。

と定義される．ところで， $\kappa_f(v)$ は $v = \pm 2i$ で極をもち，その留数は $\mp(2\pi i)^{-1}$ である．これによって (4.24) 第 1 式の 3 項目は， $T \ll 1$ のとき

$$\int_{-\frac{\pi}{\gamma}}^{\frac{\pi}{\gamma}} \kappa_f(v-x+i(2-\delta))e^{\bar{g}(x+\delta i)}dx = -e^{\bar{g}(v)} + \int_{-\frac{\pi}{\gamma}}^{\frac{\pi}{\gamma}} \kappa_f(v-x+3i)e^{\bar{g}(x+i)}dx \sim -e^{\bar{g}(v)}$$

となる．なお，上式右辺の積分及び (4.24) 第 1 式の第二項にあらわれる積分は $e^{\bar{g}(v)}$ と比べて無視できる．従って， $c(v) \sim e^{g(v)}(1+e^{\bar{g}(v)})$ ．同様にして， $\bar{c}(v) \sim e^{\bar{g}(v)}(1+e^{g(v)})$ ．これから

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln Z^{(n)} = \frac{1}{2\pi\tilde{A}} \left\{ \int_{-\frac{\pi}{\gamma}}^{\frac{\pi}{\gamma}} \epsilon_f(x)e^{g(x)}dx + \int_{-\frac{\pi}{\gamma}}^{\frac{\pi}{\gamma}} \bar{\epsilon}_f(x)e^{\bar{g}(x)}dx + \int_{-\frac{\pi}{\gamma}}^{\frac{\pi}{\gamma}} [\epsilon_f(x) + \bar{\epsilon}_f(x)]e^{g(x)+\bar{g}(x)}dx \right\}.$$

第一項及び第二項の積分は積分路をそれぞれ $i\infty$ ， $-i\infty$ ずらせば評価でき，第三項の積分は鞍点法を用いて計算することができる．結果として

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{J}^{(n)2} \rangle - \langle \mathcal{J}^{(n)} \rangle^2 &= (J \sinh \gamma)^2 e^{\beta J \sinh \gamma} \delta_{n1} + \frac{(-1)^{n-1} (-2J \sinh \gamma)^{\frac{4n-1}{2}} e^{\frac{2J\beta_0 \sinh \gamma}{T}}}{\sqrt{-2\pi\beta_2}} \\ &\quad \times \left\{ \beta_0 \beta_{n-1}^2 T^{\frac{1}{2}} + \frac{\beta_2 \beta_{n-1}^2 + 2\beta_0(\beta_n^2 + \beta_{n-1}\beta_{n+1})}{-4J\beta_2 \sinh \gamma} T^{\frac{3}{2}} + O(T^{\frac{5}{2}}) \right\} \quad (4.25) \end{aligned}$$

が得られる．ここで

$$\beta_n = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-1)^k k^n e^{-|k|\gamma} \quad \beta_0 = \frac{\sinh \gamma}{1+\Delta} \quad \beta_1 = 0 \quad \beta_2 = -\frac{\sinh \gamma}{(1+\Delta)^2}$$

である．これを用いれば， $D_Q = \beta^2(\langle \mathcal{J}^{(2)2} \rangle - \langle \mathcal{J}^{(2)} \rangle^2)$ の低温での振舞いは

$$D_Q = \frac{(-2J)^{\frac{5}{2}} (\Delta-1)^2 e^{\frac{2J(\Delta-1)}{T}}}{\sqrt{2\pi}} \left\{ T^{-\frac{1}{2}} + O\left(T^{\frac{1}{2}}\right) \right\} \quad (4.26)$$

となる．ここで指数 $2|J|(\Delta-1)$ はマグノンの励起ギャップであり [53]，このことは強磁性領域の低温極限では熱は主としてマグノンによって運ばれていることを示唆する．これに対して比熱は，

$$C = \frac{(J \sinh \gamma)^2 e^{\frac{J \sinh \gamma}{T}}}{T^2} + \frac{(-2J)^{\frac{3}{2}} (\Delta-1)^2 e^{\frac{2J(\Delta-1)}{T}}}{\sqrt{2\pi}} \left\{ T^{-\frac{3}{2}} + \frac{3}{-4J(\Delta-1)} T^{-\frac{1}{2}} + O\left(T^{\frac{1}{2}}\right) \right\}$$

と振舞う．第 1 項にあらわれる指数 $|J| \sinh \gamma$ は，強磁性領域での 1 スピノンの励起ギャップである [53]．この式から，低温比熱には $\Delta < 5/3$ ではマグノン励起が支配的に寄与し， $\Delta > 5/3$ ではスピノン励起が支配的に寄与している．すなわち $\Delta = 5/3$ において，マグノン支配の比熱とスピノン支配の比熱のクロスオーバーが起こる．この現象は D_Q には現れず，マグノン励起が支配的である．(4.10) 式との類似の議論を用いると，マグノン比熱 C_{mag} と熱的 Drude 重み D_Q の比

$$\frac{D_Q}{C} = -2JT = v_{\text{mag}}^2$$

はマグノンの速度を与え，ギャップの存在のため $T \rightarrow 0$ において $v_{\text{mag}} \rightarrow 0$ になる．しかし，前節同様， $T > 0$ では有限温度効果のため $D_Q > 0$ となり熱伝導は弾道的になる．

4.2.2 高温極限 $T \gg 1$

高温極限での振舞いは、無質量領域における議論がそのまま使える。すなわち、(4.19) 式において、 $\gamma \rightarrow i\gamma$ と変換すればよく次式で与えられる。

$$D_Q = \frac{J^4(1 + 2\cosh^2 \gamma)}{2T^2} = \frac{J^4(1 + 2\Delta^2)}{2T^2} \quad \text{for } T \gg 1. \quad (4.27)$$

5 XXZ 鎖のスピンの伝導

一般に、通常の3次元系の場合には、カレントが保存する場合のみ Drude 重みが有限となり、散乱によってカレントが保存しない非自明な系では Drude 重みはゼロとなる。ところが、1次元系の場合、カレントが保存しない場合でも有限の Drude 重みを示す系の存在が知られている。ここでは、その典型例として、XXZ 鎖のスピンの伝導を議論しよう。

3章で述べたように、XXZ 鎖におけるスピン流 \mathcal{J}_S (3.4a) は一般には保存しない (cf. (3.9))。このときスピン Drude 重み D_S は、(2.7) あるいは (2.8) 式を用いて、

$$D_S^I = \beta \sum_{\substack{m,n \\ E_m = E_n}} p_m |\langle m | \mathcal{J}_S | n \rangle|^2, \quad D_S^{II} = \langle -\mathcal{K} \rangle - 2 \sum_{\substack{m,n \\ E_m \neq E_n}} p_n \frac{|\langle m | \mathcal{J}_S | n \rangle|^2}{E_m - E_n} \quad (5.1)$$

と書ける。ただし、2番目の等式で、 $\langle \mathcal{K} \rangle = \langle J \sum (\sigma_k^+ \sigma_{k+1}^- + \sigma_{k+1}^+ \sigma_k^-) \rangle$ は運動エネルギーであり、

$$\int_0^\beta \langle \mathcal{J}_S(-i\lambda) \mathcal{J}_S \rangle d\lambda = \int_0^\beta \langle \dot{\mathcal{J}}(-i\lambda) \mathcal{J}_S \rangle d\lambda = \frac{1}{i} \langle [\mathcal{J}, \mathcal{J}_S] \rangle \xrightarrow{L \rightarrow \infty} \langle -\mathcal{K} \rangle, \quad \mathcal{J} := \sum k S_k^z$$

なる関係式を利用した。もちろん、(5.1) 式で与えられる D_S^I 及び D_S^{II} は、熱力学的極限 $L \rightarrow \infty$ で等しくなり、以下特に断らない限り、スピン Drude 重みとして上の二つを区別せずに D_S と書くことにする。実は、(2.9a) 式で与えられる D_S は、系にひねり境界条件 $\psi(x+L) = e^{i\Phi} \psi(x)$ ($\psi(x)$ は波動関数) を課したときのサイトあたりの内部エネルギー $e(\Phi)$ の Φ に対する曲率

$$D_S = \lim_{L \rightarrow \infty} L^2 \frac{d^2 e(\Phi)}{d\Phi^2} \Big|_{\Phi=0} = \lim_{L \rightarrow \infty} L^2 \sum_n p_n \frac{d^2 E_n(\Phi)}{d\Phi^2} \Big|_{\Phi=0} \quad (5.2)$$

で与えられる。このことは、ひねり境界条件を課した系

$$\mathcal{H}(\Phi) = \mathcal{H}_0(\Phi) - h\mathcal{M}; \quad \mathcal{H}_0(\Phi) = J \sum_{k=1}^L \left\{ e^{i\frac{\Phi}{L}} \sigma_k^+ \sigma_{k+1}^- + e^{-i\frac{\Phi}{L}} \sigma_{k+1}^+ \sigma_k^- + \frac{\Delta}{2} (\sigma_k^z \sigma_{k+1}^z - 1) \right\} \quad (5.3)$$

に対して、そのエネルギースペクトルをひねり角 Φ に関して2次のオーダーまで展開すると

$$E_n(\Phi) = E_n(0) + \frac{\Phi}{L} \langle n | \mathcal{J}_S | n \rangle + \frac{1}{2} \left(\frac{\Phi}{L} \right)^2 \left\{ -\langle n | \mathcal{K} | n \rangle - 2 \sum_{\substack{m,n \\ E_m \neq E_n}} \frac{|\langle m | \mathcal{J}_S | n \rangle|^2}{E_m - E_n} \right\}$$

となっていることからわかる。

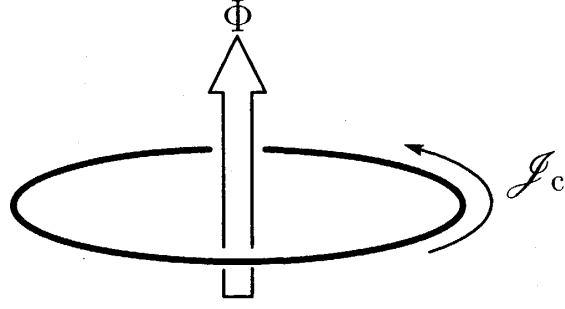


図 5.1: (5.3) 式を Jordan–Wigner 変換したスピネスフェルミオン系. (5.3) 式でのひねり角 Φ はリングを貫く磁束に相当する.

このことを, より物理的なことばで述べておこう. XXZ 鎖は, Jordan–Wigner 変換によってスピネスフェルミオン系にうつすことができるが, (5.3) 式に現れるひねり角 Φ はリング上のスピネスフェルミオン系を貫く磁束 Φ に相当する (図 5.1). この磁束の存在により波動関数 ψ は $\psi \rightarrow e^{i\Phi/L}\psi$ と変化を受ける. 言い換えると, 擬運動量 p (相互作用の効果を繰り込んだ運動量. (A.12) 式参照) は $p \rightarrow p + \Phi/L$ のようにシフトする. 一方, 電流 J_c は, エネルギースペクトルを (擬) 運動量で微分したもので与えられるが ($J_c = E'(p)$), 運動量のシフトを考慮すれば, これは $J_c = E'(p) = \partial_\Phi E(p)|_{\Phi=0}$ に他ならない. Φ が十分小さいとすれば, 電流 J_c は Φ の変化に対して線形に応答するであろう. Drude 重みは, つまるところ, この比例係数に他ならない.

5.1 絶対零度 $T = 0$ における Drude 重み

さて, 絶対零度 $T = 0$ における D_S (5.2) の振舞いを見よう. ひねり角 Φ を課した系に対して, サイトあたりの基底状態エネルギー $e_0(\Phi)$ は Bethe 仮説法によって

$$e_0(\Phi) = -\frac{2\pi A}{L} \sum_{j=1}^M a_1(v_j(\Phi)) - \left(\frac{1}{2} - m\right) h \quad (5.4)$$

と与えられる (cf. (A.13)). A は (3.13) 式で定義され, m は磁化密度である. また, M 個の未知数 $v_j(\Phi)$ ($j \in \mathbb{Z}_{1 \leq j \leq M}$) は, Bethe 仮説方程式 (A.14) あるいは, その対数を取った

$$\mathcal{Z}(v_j(\Phi), \Phi) = \frac{2\pi I_j}{L}; \quad \mathcal{Z}(v, \Phi) := p_1(v) + \frac{\Phi}{L} - \frac{1}{L} \sum_{k=1}^M p_2(v - v_k) \quad (5.5)$$

の解として与えられる (cf. (A.16)). ここで I_j は基底状態を与える量子数であり, 原点对称に稠密に分布する整数 (M : 奇数) または半整数 (M : 偶数) で与えられる (Appendix A.3 参照). また, 関数 $p_n(v)$ は (A.16) 式で定義される. さて, $e_0(\Phi)$ (5.4) の Φ^2 の係数を評価するために, Bethe 仮説方程式の根 $v_j(\Phi)$ を

$$v_j(\Phi) = v_j + \left(\frac{\Phi}{L}\right) g^{(1)}(v_j) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Phi}{L}\right)^2 g^{(2)}(v_j) + O((\Phi/L)^3) \quad (5.6)$$

と表そう。これを $Z(v, \Phi)$ に代入し, $Z(v, \Phi) = Z(v) + Z^{(1)}(v)\Phi/L + Z^{(2)}(v)\Phi^2/2L^2$ と展開すれば, $Z(v)$ は (A.16) 式で与えられるものと一致し, これは熱力学的極限 $L \rightarrow \infty$ において

$$Z(v) = p_1(v) - \frac{1}{L} \sum_{k=1}^M p_2(v - v_k) \xrightarrow{L \rightarrow \infty} Z(v) = p_1(v) - \int_{-Q}^Q p_2(v - x) \rho(x) dx \quad (5.7)$$

となる。ここで $\rho(v)$ は, 分布関数 (A.17) であり, $\pm Q$ は Fermi 点に対応する。 $Z^{(1,2)}(v)$ も同様に

$$\begin{aligned} Z^{(1)}(v) &= 1 + 2\pi \int_{-Q}^Q a_2(v - x) \rho(x) g^{(1)}(x) dx, \\ Z^{(2)}(v) &= 2\pi \int_{-Q}^Q a_2(v - x) \rho(x) g^{(2)}(x) dx - 2\pi \int_{-Q}^Q a_2'(v - x) \rho(x) g^{(1)2}(x) dx. \end{aligned}$$

なお, $a_n(v) = \partial_v p_n(v)/(2\pi)$ は (A.12) 式で与えられる。また, (5.5) 第1式より

$$\frac{2\pi I_j}{L} = Z_j + \left(\frac{\Phi}{L}\right) (Z_j' g_j^{(1)} + Z_j^{(1)}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Phi}{L}\right)^2 (Z_j' g_j^{(2)} + Z_j'' g_j^{(1)2} + 2Z_j^{(1)} g_j^{(1)} + Z_j^{(2)}) \quad (5.8)$$

となる。ここで, $Z(v_j) = Z_j$ 等の略号を用いた。 $Z_j = 2\pi I_j/L$ であるから, 右辺第二項, 第三項はそれぞれゼロとなる。熱力学的極限 $L \rightarrow \infty$ を取れば, $\{v_j\}$ は連続変数となり

$$Z'(v)g^{(1)}(v) + Z^{(1)}(v) = 0, \quad Z'(v)g^{(2)}(v) + Z''(v)g^{(1)2}(v) + 2Z^{(1)}(v)g^{(1)}(v) + Z^{(2)}(v) = 0 \quad (5.9)$$

が成立する。(5.7) 式と (A.17) 式より, $Z'(v) = 2\pi\rho(v)$ と書け, 従って (5.9) 第1式から, $Z^{(1)}(v) = -2\pi\rho(v)g^{(1)}(v)$ と表される。これを (5.8) 第1式に代入すれば

$$g^{(1)}(v) = -\frac{\xi(v)}{2\pi\rho(v)} \quad (5.10)$$

が得られる。ここで $\xi(v)$ は (A.23) 式で定義される関数である。また, 上で得た $Z, Z^{(1)}$ を (5.9) 第2式に代入すれば, $g^{(2)}(v)$ に関する積分方程式

$$\rho(v)g^{(2)}(v) = \partial_v \left[\rho(v)g^{(1)2}(v) + \int_{-Q}^Q a_2(v - x) \rho(x) g^{(1)2}(x) dx \right] - \int_{-Q}^Q a_2(v - x) \rho(x) g^{(2)}(x) dx \quad (5.11)$$

が得られる。さて, $e_0(\Phi)$ (5.4) に (5.6) 式を代入して展開すれば, D_S は

$$D_S = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{d^2 e_0(\Phi)}{d\Phi^2} \Big|_{\Phi=0} = -2\pi A \left[\int_{-Q}^Q a_1'(v) \rho(v) g^{(2)}(v) dv + \int_{-Q}^Q a_1''(v) \rho(v) g^{(1)2}(v) dv \right]. \quad (5.12)$$

dressed energy (A.19) の両辺を v で微分したものは

$$\varepsilon'(v) = -2\pi A a_1'(v) - \int_{-Q}^Q a_2(v - x) \varepsilon'(x) dx \quad (5.13)$$

となるが ($\varepsilon(\pm Q) = 0$ を用いていることに注意), これと (5.11) 式より¹¹,

$$-2\pi A \int_{-Q}^Q a_1'(v) \rho(v) g^{(2)}(v) dv = \int_{-Q}^Q \varepsilon'(v) [\rho(v) g^{(1)2}(v)]' dv + \int_{-Q}^Q dv \int_{-Q}^Q dx a_2'(v - x) \varepsilon'(v) \rho(x) g^{(1)2}(x).$$

¹¹線形積分方程式 $f(v) = c_1(v) + \int_{-Q}^Q b(v - x) f(x) dx$, $g(v) = c_2(v) + \int_{-Q}^Q b(v - x) g(x) dx$ の解で与えられる関数 $f(v)$, $g(v)$ に関して, $\int_{-Q}^Q c_1(v) g(v) dv = \int_{-Q}^Q c_2(v) f(v) dv$ が成立する。

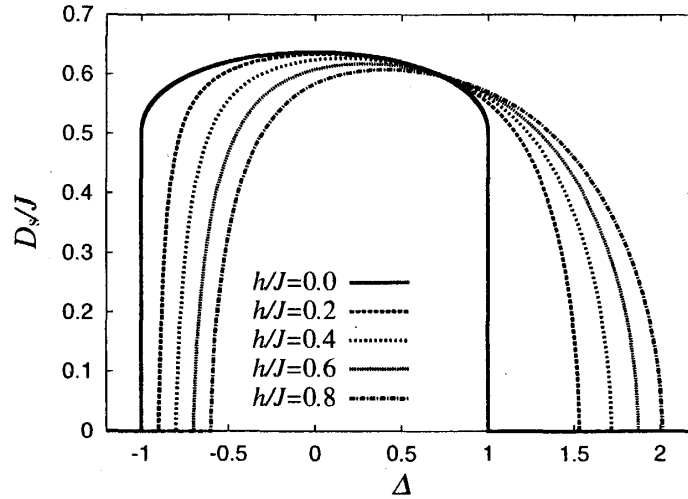


図 5.2: 絶対零度 $T = 0$ におけるスピン Drude 重み D_S の Δ 及び磁場依存性.

上式第一項を部分積分して (5.12) 式に代入し, (5.13) の両辺を微分したものを用いれば,

$$D_S = 2\varepsilon'(Q)\rho(Q)g^{(1)2}(Q) = \frac{\varepsilon'(Q)\xi^2(Q)}{2\pi^2\rho(Q)} = \frac{v_s\xi^2(Q)}{\pi} \quad (5.14)$$

が得られる. ここで, (5.10) 及び, (A.24) で定義されるスピノンの励起速度 v_s を用いた. この D_S は, 磁化 m (A.18) を h で微分した帯磁率 $\chi = \xi^2(Q)/(\pi v_s)$ によって

$$D_S = \chi v_s^2$$

と表すこともできる. この等式の意味は, 低温での熱的 Drude 重みの現象論的な解釈 (4.2.1 節参照) と同様の議論によって説明される. すなわち, 不純物等, 可積分性を壊す効果によって, 現実の系ではスピン伝導率は有限となる. その効果が十分弱いならば, 実際のスピン伝導率は, (4.11) 式に相当する Lorentz 曲線で表され, ゼロ周波数では $\sigma_S = D_S\tau$ となるであろう. これと現象論から導出される $\sigma_S = \chi v_s^2\tau$ とを比べると上の関係式が成立することがわかる. また, ギャップが存在する領域では $v_s = 0$ となり $D_S = 0$ となる (電気伝導に置き換えると絶縁体に相当).

(5.14) 式に基づき, 絶対零度における D_S の振舞いを, 様々な磁場及び相互作用に関してプロットしたものが図 5.2 である. 特にゼロ磁場 $h = 0$ かつ $-1 \leq \Delta \leq 1$ では $Q = \infty$ となり, さらに (A.26) 式を使えば D_S は次式で与えられる.

$$D_S = \frac{\pi J \sin \gamma}{2\gamma(\pi - \gamma)} \quad \text{for } h = 0, \quad -1 \leq \Delta = \cos \gamma \leq 1. \quad (5.15)$$

5.2 有限温度 $T > 0$ における Drude 重み

前節では, 絶対零度でのスピン Drude 重みを議論し, 無質量領域で $D_S > 0$ となり, 有質量領域では $D_S = 0$ となることを見た. ここでは有限温度 $T > 0$ の場合を議論しよう.

熱伝導の場合には無質量、有質量領域いずれの場合でも、有限温度では熱的ドルーデ重みは有限であったが、スピン伝導に関してはどうか？藤本-川上によって開発された Hubbard 模型に対する Drude 重みの導出法 [57] を、XXZ 鎖に適用した Zotos の議論 [7] に基づいて考察しよう。

はじめに、 $-1 \leq \Delta = \cos \gamma \leq 1$ の範囲にある場合を考える。式の煩雑さを避けるため、特に、 $\gamma = \pi/\nu$; $\nu \in \mathbb{Z}_{\geq 2}$ の場合を考える。前節で議論したように、スピン Drude 重みは、ひねり角 Φ をもつひねり境界条件を課した場合のエネルギースペクトルの Φ に対する曲率で表される。Appendix A.3にあるように、XXZ 鎖の熱力学は Bethe 仮説方程式の根にストリングと呼ばれる解 (A.29) を仮定することによって議論され、ひねり境界の場合、内部エネルギー (5.4) は

$$e(\Phi) = -\frac{2\pi A}{L} \sum_{\alpha=1}^{\nu} \sum_{j=1}^{M_{\alpha}} a_{n_{\alpha}}(v_j^{\alpha}(\Phi) + \delta_{\alpha\nu} \nu i) - \left(\frac{1}{2} - m\right) h, \quad m = \frac{1}{L} \sum_{\alpha=1}^{\nu} n_{\alpha} M_{\alpha}$$

で与えられる (cf. (A.34)). $v_j^{\alpha}(\Phi)$ はひねり角 Φ を課したときの n_{α} ストリングの実部であり

$$Z_{\alpha}(v_j^{\alpha}(\Phi), \Phi) = \frac{2\pi I_j^{\alpha}}{L}; \quad Z_{\alpha}(v, \Phi) = t_{\alpha}(v) + \frac{n_{\alpha}}{L} \Phi - \frac{1}{L} \sum_{\beta=1}^{\nu} \sum_{k=1}^{M_{\beta}} \Theta_{\alpha\beta}(v - v_k^{\beta})$$

を満たす (cf. (A.31)). さて、有限温度の Drude 重みは (5.2) 式で与えられるが、これを得るため、ストリングの実部 $v_{\alpha}^j(\Phi)$ を

$$v_j^{\alpha}(\Phi) = v_j^{\alpha} + \left(\frac{\Phi}{L}\right) g_{\alpha}^{(1)}(v_j^{\alpha}) + \frac{1}{2} \left(\frac{\Phi}{L}\right)^2 g_{\alpha}^{(2)}(v_j^{\alpha}) + O((\Phi/L)^3) \quad (5.16)$$

と展開し前節と同じように議論すればよい。少し長い計算の後、

$$D_S = -\frac{A}{2\pi\beta} \sum_{\alpha=1}^{\nu} (-1)^{\delta_{\alpha\nu}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(\partial_v \ln \eta_{\alpha}(v))^2 (\partial_{\beta h} \ln \eta_{\alpha}(v))^2}{(1 + \eta_{\alpha}(v)^{-1})(1 + \eta_{\alpha}(v))(\partial_{\beta} - n_{\alpha} h \partial_{\beta h}) \ln \eta_{\alpha}(v)} dv \quad (5.17)$$

が得られる。ここで $\eta_{\alpha}(v)$ は、熱力学的ベテ仮説方程式 (A.35) の解である。特に、XY 鎖 ($\Delta = 0$) の場合、 $\ln \eta_{\alpha}(v) = -\beta(2\pi A a(v, \alpha) - n_{\alpha} h)$ ($\alpha = 1, 2$) より

$$D_S(\Delta = 0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\beta J^2 \sin^2 p}{\cosh(\beta J \cos p - \beta h/2)} dp \quad (5.18)$$

となり、XY 模型の運動エネルギー (に負号をかけたもの) と一致する ($D_S = \langle -\mathcal{H} \rangle$) (cf. (5.1)).

図 5.3 にゼロ磁場におけるスピン Drude 重みの温度依存性を示した。結果として、 D_S は温度の増加とともに単調減少し、また、異方性相互作用 Δ の増加とともに減少する。ここでは詳しく論じないが、(5.17) 式の解析を進めると、 $\Delta \nearrow 1$ のとき有限温度 $T > 0$ で $D_S = 0$ となることがわかる。すなわち、前節の絶対零度での解析とあわせると、このとき D_S の振舞いは $T = 0$ で不連続となる。また、 $\Delta > 1$ のときは、 $T = 0$ を含め有限温度で $D_S = 0$ となる。この振舞いは熱伝導率の場合とは対照的である。

ところが、最近、 $\Delta \neq 0$ の場合にストリング解の有限サイズ補正に基づいて導出された (5.17) 式と、場の理論に基づくアプローチや、量子モンテカルロ法を用いた数値的アプローチとの相違が指摘されている。(5.17) 式により得られる D_S の低温での振舞いは

$$D_S(T) = D_S(0) - \text{const.} T^{\frac{2}{\nu-1}}$$

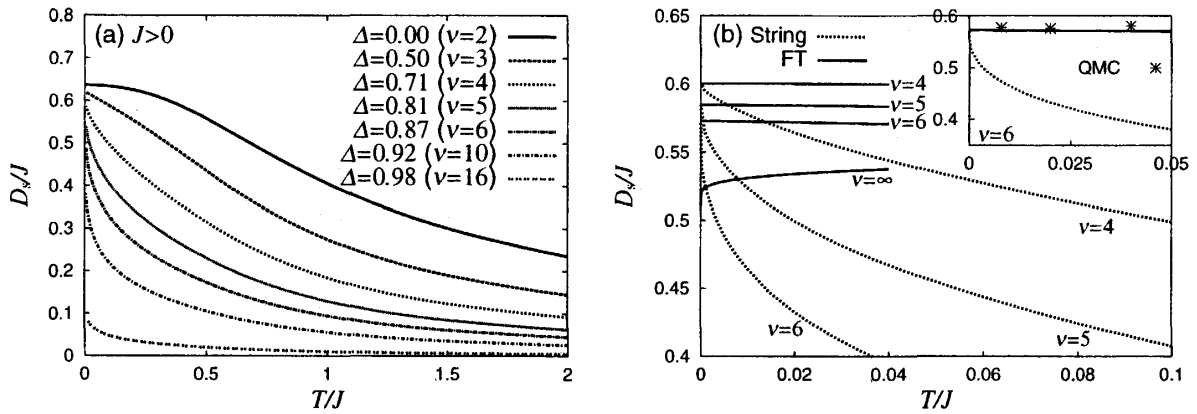


図 5.3: (a) $J > 0$, $\Delta \geq 0$, $h = 0$ のときのスピン Drude 重み D_S の温度依存性. $\Delta \geq 1$ のとき $T > 0$ で $D_S = 0$ となる. (b) 場の理論及び数値的なアプローチとの相違.

であるが、これに対し、場の理論に基づく解析では

$$D_S^{\text{FT}}(T) = D_S(0) + \begin{cases} \text{const.} \cdot T^2 & \text{for } 0 < \Delta < 1/2 \ (2 < \nu < 3) \\ \text{const.} \cdot T^{\frac{4}{\nu-1}} & \text{for } 1/2 < \Delta < 1 \ (3 < \nu < \infty) \end{cases}$$

と食い違う。特に、 $\Delta = 1$ ($\nu = \infty$) の場合

$$D_S^{\text{FT}}(T) = \frac{J}{4} \left(1 + \frac{g}{2} + O(g^2) \right); \quad g^{-1} + \frac{1}{2} \ln g = \ln(2\sqrt{2\pi}e^{\gamma_E+1/4} J/T); \quad \gamma_E: \text{Euler's const.} \quad (5.19)$$

すなわち、 $D_S^{\text{FT}}(T) > 0$ となり (5.17) 式から得られる結果 $D_S(T) = 0$ と明らかに矛盾する¹²。さらに、Alvarez-Gros による数値計算の結果は、場の理論による結果を支持する (図 5.3 参照)。

この相違はどこから来るのであろうか？実は、系の熱力学を定式化するとき用いたストリング解 (Appendix A.3) の仮定に問題があり、実際にストリング仮説からは記述できない解の存在が報告されている。このストリング仮説からの deviation が、ストリング解の有限サイズ補正 (5.16) から導出される Drude 重み (5.17) に有意に影響し、このことが実際の場の理論や数値計算との相違を引き起こしていると考えられる¹³。残念ながら、現在のところ、ストリング仮説を用いずにすべての温度で D_S を正しく計算する手法は開発されていない。

6 磁気熱効果

電子系では、系に温度勾配を与えると電位差が生じ、あるいは逆に電位差を与えたとき温度勾配が生じる熱電効果の存在は古くから知られるが、第 2 章でも述べたように、スピン系では類似の効果として磁気熱効果と呼ばれる現象が期待される (図 6.1)。磁氣的 Seebeck 係数 (2.5) は、こ

¹²[9] には誤植があり、(5.19) 第 1 式のように、 $g/2$ にかかる符号はプラスとすべきである

¹³一方、ストリング仮説によって導出される熱力学量は、それを用いない手法によって定式化されたそれと熱力学的極限 $L \rightarrow \infty$ において厳密に一致することが示されている [58]。すなわちストリング仮説の deviation から来る寄与は、熱力学的極限において比熱や帯磁率などバルクの熱力学量には影響を及ぼさない。

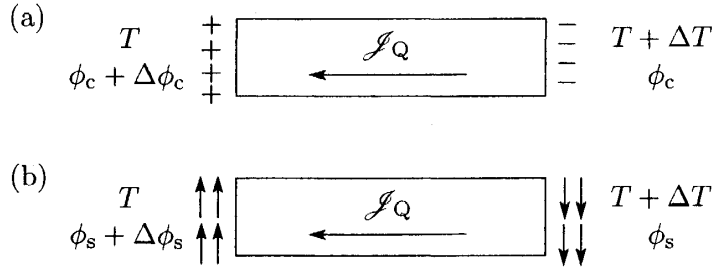


図 6.1: (a) 熱電効果を模式的に示した図. キャリアを + 電荷を持った粒子だとすれば, 低温側が高電位, 高温側が低電位となる. (b) スピン系における磁気熱効果.

の効果の大きさをはかる量として定義される. 一方, Hall 効果が現れない 1 次元系では, (磁氣的)Seebeck 係数はまた, 伝導の担い手であるキャリアの種類を判定する重要な指標となる. 例えば, $S < 0$ であれば, ダウンスピンのキャリアが支配的に伝導に関与し, 逆に $S > 0$ であればアップスピンのキャリアが支配的な伝導の担い手となる (図 6.1). この章では XXZ 鎖における磁場中の輸送特性, 特にこの磁気熱効果に関して議論する.

第 3 章で議論したように, XXZ 鎖の場合, ゼロ磁場 ($h = 0$) のときは系にスピン反転対称性が存在するため, (2.2) 式で与えられる輸送係数の非対角要素 L_{SQ} は $L_{SQ} = 0$ となり磁気熱効果は消失する. よりわかりやすく言えば, $h = 0$ のとき系の磁化はゼロであり, アップスピンとダウンスピンの両方とも等しく伝導に寄与する.

一方, 有限磁場 ($h > 0$) の場合, 系のスピン反転対称性が破れ, 磁気熱効果が実際に出現する. このとき, 磁場を強くしていくと, 系のスピンは上を向いた状態が多くなり, このため直観的にはダウンスピンが支配的に輸送を担う, つまり, 磁氣的 Seebeck 係数は負になると考えられる. これは, すべてのスピンの上を向いた極端な状態を考え, 励起によって現れたダウンスピンがアップスピンの海の中を泡のように移動する描像を思い浮かべるとよい. 後で述べるが, 実際に相互作用のない XY 模型や $\Delta > 0$ の強磁性的な領域では, $S < 0$ となりこの直観的な描像は正しい. ところが $\Delta > 0$ のとき, これは正しくないことがわかる.

さて, $h > 0$ のとき, 熱的 Drude 重みは, $h = 0$ のときの (3.7) 式から磁気熱効果の寄与を加えた (3.6) 式に改められる. また, (2.5) 式で与えられる磁氣的 Seebeck 係数は明示的に

$$S = \frac{1}{T} \left\{ \frac{\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle}{D_S} \frac{1}{T} - h \right\} \quad (6.1)$$

と書くことができる. これらの式を見ればわかるように, 磁場中の熱伝導や磁気熱効果には, カレントの相関関数 $\langle \mathcal{J}_E^2 \rangle$ や $\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle$ のほかに, スピン Drude 重み D_S が関わってくる. ところが, 前章で議論したように, 今のところスピン Drude 重み D_S を任意の温度において正しく計算する手法はない. そこで, 我々は (i) 現象論を用いた解析, 及び (ii) 厳密対角化を用いた数値的な手法の 2 つの方法を組み合わせることによって XXZ 模型の磁気熱効果を議論する.

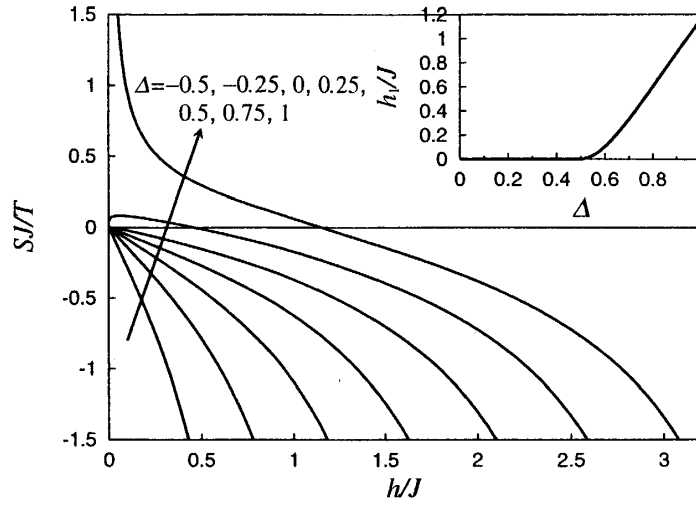


図 6.2: 磁氣的 Seebeck 係数 S の低温での振舞い. $\Delta \gtrsim 0.5$ の場合 $h = h_1$ を境に S の符号の反転現象が起こる. インセット: h_1 の Δ 依存性.

6.1 現象論を用いた解析

4.1.2 節では, ゼロ磁場 $h = 0$ かつ $-1 \leq \Delta \leq 1$ の無質量模型の低温での振舞いを解析したが, このときの熱的 Drude 重みの振舞いは現象論を用いて解釈することができた. ここでは, 有限磁場 $0 < h < h_c$ (h_c : 臨界磁場) においてもこの解釈が可能であるとし D_Q は低温で (4.9), すなわち,

$$D_Q = \beta^2 \langle \mathcal{J}_E^2 \rangle - \beta^3 \frac{\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle^2}{D_S} = \frac{\pi}{3} v_s T \quad \text{for } T \ll 1, T \ll h \quad (6.2)$$

を仮定する. ただし, v_s は (A.24) 式で与えられる有限磁場でのスピノンの励起速度であり, 対数補正などの特有の効果が irrelevant となる $T \ll 1$ かつ $T \ll h$ ($\beta h \gg 1$) の場合を考える. つまり, (6.2) 式を仮定することにより, 間接的に D_S の低温での振舞いを導こうというわけである. これにより無質量領域における磁氣的 Seebeck 係数 (6.1) の低温での振舞いが議論できる.

これを達成するためには, $\langle \mathcal{J}_E^2 \rangle$, $\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle$ を求めなければならない. そこで, まず, $\lambda_0, \lambda_1 \in \mathbb{R}$ でパラメータ化した分配関数 $Z(\lambda_0, \lambda_1) = \text{Tr} e^{-\beta(\lambda_0 \mathcal{H}_0 - h \mathcal{H} + \lambda_1 \mathcal{J}_E)}$ を考える. この分配関数は量子転送行列法 (cf. Appendix B) を用いて

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln Z(\lambda_0, \lambda_1) = \frac{\beta h}{2} + \oint_C a_1(x+i) \ln(1 + \eta(x+i)^{-1}) dx$$

と表され ((B.16) 式参照), $\eta(v)$ は非線形積分方程式

$$\ln \eta(v) = -2\pi\beta A(\lambda_0 + \lambda_1 A \partial_v) a_1(v) + \beta h + \oint_C a_2(v-x-i) \ln(1 + \eta(x+i)^{-1}) dx \quad (6.3)$$

の解として与えられる. $\langle \mathcal{J}_E^2 \rangle$ に関しては, これを用いると

$$\langle \mathcal{J}_E^2 \rangle = \frac{1}{\beta^2} \oint_C a_1(x+i) \partial_{\lambda_1}^2 \ln(1 + \eta(x+i)^{-1}) \Big|_{\lambda_0=0, \lambda_1=0} dx$$

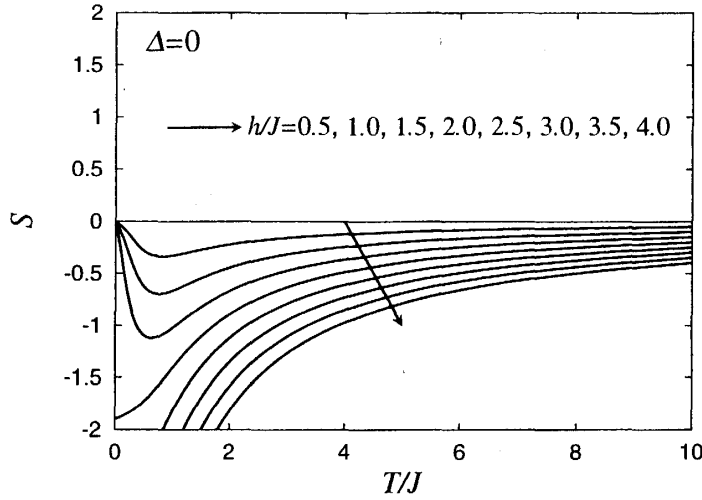


図 6.3: XY 模型 $\Delta = 0$ の場合の磁気的ゼーベク係数 S の温度・磁場依存性. 臨界磁場は $h_c = 2J$.

と与えられるが, $\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle$ に関しては \mathcal{J}_S が保存量ではなく, 従って $\mathcal{J}_E \mathcal{J}_S$ も保存量たりえず上のような議論はできない. しかし, Louis-Gros によって導き出された \mathcal{J}_E^2 と $\mathcal{J}_E \mathcal{J}_S$ を熱力学的極限 $L \rightarrow \infty$ において結びつける等式 [32]

$$\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \Delta \mathcal{H}_0 \rangle = \langle \mathcal{J}_E^2 \Delta \mathcal{M} \rangle; \quad \Delta \mathcal{H}_0 := \mathcal{H}_0 - L \langle \mathcal{H}_0 \rangle, \quad \Delta \mathcal{M} := \mathcal{M} - L \langle \mathcal{M} \rangle \quad (6.4)$$

を用いると ($\langle \dots \rangle$ はサイトあたりの熱力学的平均値), $\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle$ は

$$\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle = - \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L\beta^2} \int \partial_{\lambda_1}^2 \partial_h \ln Z(\lambda_0, \lambda_1) d\lambda_0 \Big|_{\lambda_0=1, \lambda_1=0} \quad (6.5)$$

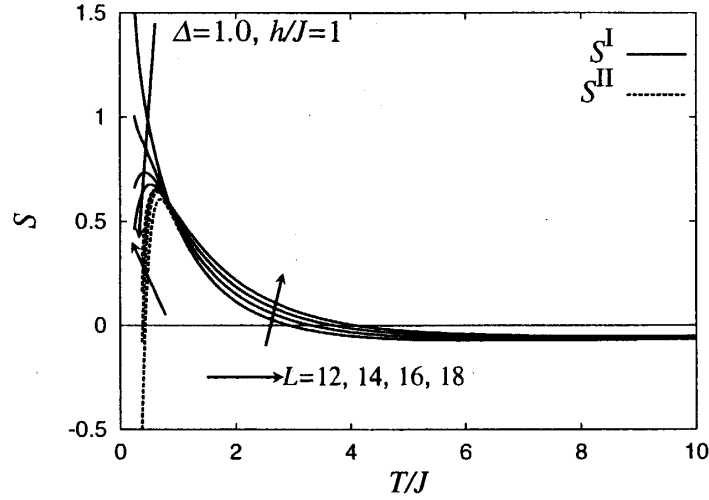
と書き表される. ここで (6.4) 式は次のように示される. 連続の方程式 (3.2) を用いると

$$\langle (j_{k+1}^S - j_k^S) \Delta h_{u+1} \rangle = \langle -i[\mathcal{H}_0, \Delta S_k^z] \Delta h_{u+1} \rangle = \langle \Delta S_k^z (i[\mathcal{H}_0, \Delta h_{u+1}]) \rangle = \langle \Delta S_k^z (j_l^E - j_{l+1}^E) \rangle.$$

ここで $\Delta S_k^z = S_k^z - \langle S_k^z \rangle$, $\Delta h_{u+1} = h_{u+1} - \langle h_{u+1} \rangle$ であり, 上の式の変形で $[\mathcal{H}, \Delta S_k^z] = [\mathcal{H}_0, \Delta S_k^z]$ を用いた. $\langle j_k^S \Delta h_{u+1} \rangle =: a_{k,l}$, $\langle j_l^E \Delta S_k^z \rangle =: b_{k,l}$ とおけば, 並進対象性より $a_{k,l} = a_{k-l} = a_m$, $b_{k,l} = b_{k-l} = b_m$ となり上の関係式から $a_{m+1} - a_m = b_m - b_{m-1}$ が示される. 従って $a_{m+1} - b_m = a_m - b_{m-1}$ となつて $c := a_m - b_{m-1}$ は m に依存しないことがわかる. これにより $|c| = |a_m - b_{m+1}| \leq \min_m \{|a_m| + |b_m|\} = |a_\infty| + |b_\infty| = 0$, すなわち $a_m = b_{m+1}$ となる. ここで, 局所演算子 h_{u+1} , j_k^S の相関関数は $|k-l| \rightarrow \infty$ において $\langle j_k^S h_{u+1} \rangle = \langle j_k^S \rangle \langle h_{u+1} \rangle$ となることを用いた. 以上の議論から $\sum a_m = \sum b_m$, つまり $\langle \mathcal{J}_S \Delta \mathcal{H}_0 \rangle = \langle \mathcal{J}_E \Delta \mathcal{M} \rangle$ が示され, 両辺を λ_1 で微分して $\lambda_1 = 0$ とおけば (6.4) 式が成り立つことがわかる.

ところで, (6.3) 式において $v \rightarrow v+i$ とした後, 両辺を h 及び λ_0 で微分したものを比べると

$$\begin{aligned} & \oint_C (\partial_h \ln \eta(v+i) - \beta) \partial_{\lambda_0} \ln(1 + \eta(v+i)^{-1}) dv \\ &= \oint_C (\partial_{\lambda_0} \ln \eta(v+i) + 2\pi\beta A a_1(v+i)) \partial_h \ln(1 + \eta(v+i)^{-1}) dv \end{aligned}$$


 図 6.4: $\Delta = 1$, $h/J = 1$ のときの磁氣的 Seebeck 係数 S の振舞い.

が成立する. この式から直ちに

$$\begin{aligned} \oint_C \partial_{\lambda_0} \ln(1 + \eta(v+i)^{-1}) dv &= -2\pi A \oint_C a_1(v+i) \partial_h \ln(1 + \eta(v+i)^{-1}) dv \\ &= -2\pi A \left\{ \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \partial_h \ln Z - \frac{\beta}{2} \right\} \end{aligned}$$

となるが, これを (6.5) 式に代入すれば $\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle$ は

$$\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle = \frac{1}{2\pi A \beta^2} \oint_C \partial_{\lambda_1}^2 \ln(1 + \eta^{-1}(v+i)) dv. \quad (6.6)$$

と簡単化される. さて, 以上の議論より $\langle \mathcal{J}_E^2 \rangle$ と $\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle$ の厳密解が得られた. あとは, これらの低温極限を考え, それと (6.2) 式から D_S の低温での振舞いを求めることができる. さらにこれらを (6.1) 式に代入すれば, 磁氣的 Seebeck 係数の振舞いがわかる. 詳しい計算は文献 [48] に譲るとして, ここでは結果のみを記す.

$$S = -\frac{\pi}{6A\rho(\Lambda)\xi(\Lambda)} \left\{ 1 + \frac{A\alpha(\Lambda)}{2\pi\rho(\Lambda)v_s^2} \right\} T \quad \text{for } T \ll 1, T \ll h. \quad (6.7)$$

ただし, $\rho(v)$, $\xi(v)$ はそれぞれ (A.17), (A.23) 式で与えられ, $\alpha(v)$ は次の積分方程式の解である.

$$\alpha(v) = -2\pi A a_1''(v) - \int_{-Q}^Q a_2(v-x) \alpha(x) dx$$

(6.7) 式の温度 T に関する比例係数の磁場依存性を図示したものが図 6.2 である. 相互作用が $-1 \leq \Delta \lesssim 0.5$ の場合, $h > 0$ であれば, 磁場の強さによらず, S は T に関して負の比例係数で立ち上がる. 一方 $0.5 \lesssim \Delta$ の場合, 磁場が $h \geq h_1$ にあるとき $S < 0$ であり, $0 < h \leq h_1$ にあるとき $S > 0$ となる. すなわち $h = h_1$ を境に磁氣的 Seebeck 係数の符号が反転する現象が見出される. このときの磁場 h_1 は相互作用 Δ に依存し, Δ の増大とともに h_1 も増大する. すなわち, 反

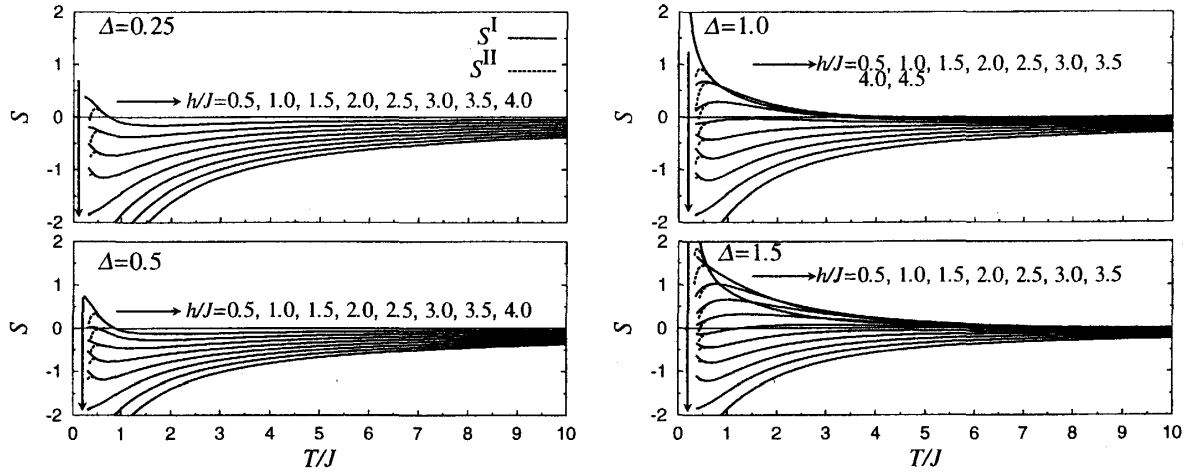


図 6.5: $J > 0$, $\Delta > 0$ における磁氣的 Seebeck 係数の温度・磁場依存性.

強磁性的な相互作用に近づけば近づくほど $S > 0$ となる磁場の範囲は広くなる. 一方, 高温極限 $T \gg 1$ では相互作用 Δ によらず

$$S \sim -\frac{h}{T} \quad \text{for } T \gg 1 \quad (6.8)$$

となることがわかる.

以上の議論は, 低温及び高温極限の話であるが, 重要なことは, $0 < h \leq h_1$ のとき, 少なくとも $\Delta \gtrsim 0.5$ であれば, ある温度 T_0 で S の符号が反転する現象が見出されることである. 言い換えれば, $T \leq T_0$ ではアップスピンのなキャリアが支配的に輸送を担い, 逆に $T_0 \leq T$ ではダウンスピンのなキャリアが支配的に輸送を担っていることを意味する.

最後に, D_S の値が厳密に得られる XY 模型の S に関して簡単に述べておく. この場合の D_S は (5.18) 式で与えられ, また $\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle$ は, (4.20) 式を導いたときと同じ手法で (6.6) 式から求められ,

$$\langle \mathcal{J}_E \mathcal{J}_S \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{J^3 \sin p \sin 2p}{\cosh^2(\beta J \cos p - \beta h/2)} dp.$$

これらを (6.1) 式に代入して S が得られる. 図 6.3 に, XY 模型の S の温度依存性, 磁場依存性を示した. XY 模型ではすべての温度, 磁場 ($h > 0$) で $S < 0$ であり, この章の冒頭で述べた描像のように, ダウンスピンのなキャリアが支配的に輸送に携わっていることがわかる. $h_c = 2J$ が臨界磁場であり, $h > h_c$ のときは, 基底状態エネルギーと励起状態エネルギーの間に有限のギャップが生じ, このため絶対零度で S は発散する.

6.2 数値計算 (厳密対角化)

上の議論は高温及び低温極限に限られた話であり, Seebeck 係数の符号反転が $\Delta \gtrsim 0.5$ の範囲外で起こるかどうかについては議論の対象外である. 最初に述べたように, 磁場中の輸送特性を任意の温度で議論するには, スピン Drude 重み D_S が必要であるが, 現在まで正しい解析解は得

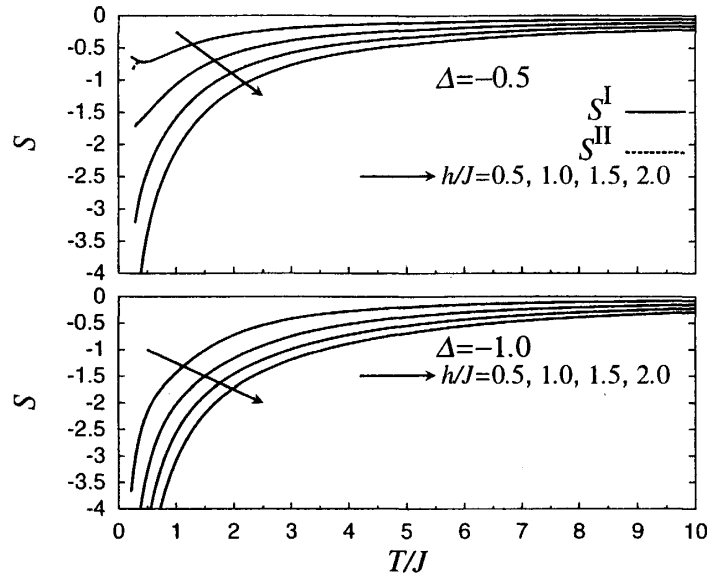


図 6.6: $J > 0$, $\Delta < 0$ における磁氣的 Seebeck 係数の温度・磁場依存性.

られていない. そこで, 本節では $L = 18$ までの数値対角化を利用して S の振舞い, とく中間温度の振舞いを議論し, また, 前節で予想された S の符号反転が実際に起こっているのか確かめる.

実際に計算するのは有限系での (6.1) 式であるが, スピン Drude 重み D_S に関しては (5.1) の D_S^I D_S^{II} で与えられるように二通りの計算の仕方がある. もちろん, これは熱力学的極限 $L \rightarrow \infty$ で等しくなるが, 一般に有限系では等しくない. そこで D_S として D_S^I を用いて計算した S を S^I , D_S^{II} を用いて計算した S を S^{II} とする. 図 6.4 に, $\Delta = 1$, $h/J = 1$ の場合の S の温度依存性及びサイズ依存性を示した. これは, 前節で見たように, 低温での振舞い (図 6.2) と高温極限 (6.8) から, ある温度で少なくとも 1 回 S の符号反転が予想される場合である. S^I 及び S^{II} は高温でよく一致し, 有限サイズ効果もそれほど大きくはない. 一方, 低温では S^I , S^{II} とともに強いサイズ依存性を示すが, これは, 主として, スピン Drude 重み D_S が低温で非常に強いサイズ依存性を持つことに由来する. この低温領域では, S^I は系のサイズの増加とともに増大し, 逆に S^{II} はサイズの増加とともに減少することがわかる. これにより, 低温領域では, 最終的に S^I と S^{II} の中間の値に収束するであろう. この結果と前節での低温での振舞いを組み合わせると, この $\Delta = 1$, $h/J = 1$ の場合, 確かにある温度 T_0 で S の符号が反転する現象が起こっていることがわかる.

$\Delta > 0$ 及び $\Delta < 0$ における磁氣的 Seebeck 係数の温度及び磁場依存性を, それぞれ図 6.5 及び図 6.6 に示した. S は磁場 h と相互作用の大きさ Δ に強く依存する. 臨界磁場より大きな磁場 $h > h_c$ (このとき絶対零度ですべてのスピンが上向きの揃う) では, S の振舞いは, XY 模型の場合と類似の振舞いをする事がわかる. すなわち, $h > h_c$ では h の増加とともに S は単調に減少していく. とくに低温では

$$S \sim -\frac{\delta}{T}; \quad \delta = h - 2J(\Delta + 1) \quad \text{for } h > h_c$$

と振舞うことが知られている [49].

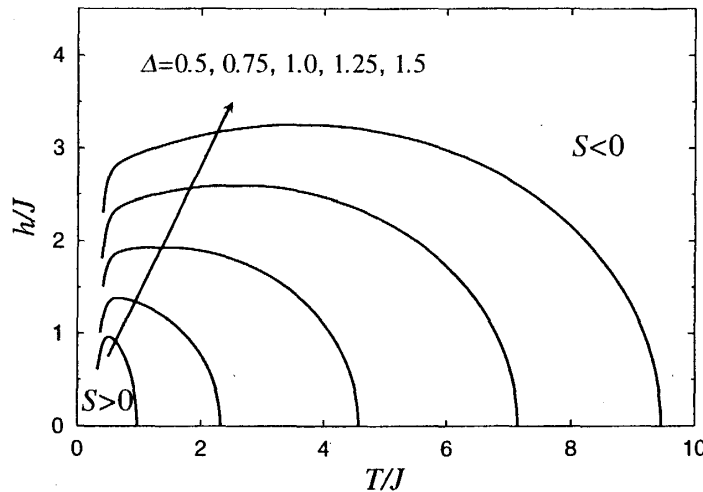


図 6.7: 磁氣的 Seebeck 係数 S の符号変化が起こる磁場と温度の境界線.

対照的に, $h < h_c$ の場合, S の振舞いは $\Delta > 0$ と $\Delta < 0$ では大きく異なっている. $\Delta > 0$ においては, ある磁場 h_2 より小さいとき ($h < h_2$), S は正の極大値を持ち, ある温度で符号を変えるが, $\Delta < 0$ のときは XY 鎖の場合と同様に常に負 $S < 0$ である. さらに, 前節の議論では, 低温極限, 高温極限とも $S < 0$ となるため S の符号変化が起こるかどうかが明らかでなかった $0 < \Delta \lesssim 0.5$ においても, S の符号がある有限温度で変化することがわかる. また, S の極大値は Δ の増大とともに大きくなり, $S > 0$ となる温度領域は広がる.

図 6.7 に, S の符号が変化する境界の点を $h-T$ 平面上に曲線として表した. すなわち, 曲線の内側では $S > 0$ の領域を表し, 逆に外側では $S < 0$ の領域を表す. これからわかることは, $\Delta > 0$ であれば, 曲線はある温度において極大値を持つ. これと, 前節の低温での S の振舞いを考え合わせれば, 磁場が $h_1 < h < h_2$ のとき, 符号変化が温度 T_1 と T_2 ($T_1 < T_2$) で 2 度起こる. すなわち $T_1 < T < T_2$ のとき $S(T) > 0$ であり, $0 < T < T_1$ もしくは $T > T_2$ で $S(T) < 0$ となる. 一方, $0 < h < h_1$ のとき符号変化が起きるのは $T = T_0$ のときのみであり, $T < T_0$ で $S(T) > 0$, 逆に $T_0 < T$ で $S(T) < 0$ となる. ここで, h_2 は図 6.7 における曲線の最大値であり, h_1 は前節に定義した磁場である (図 6.2 参照).

このような反強磁性領域における磁氣的 Seebeck 係数の顕著な振舞いは, 定性的に次のように解釈される. そのために以下の極端な場合について考えてみよう. (i) $h \gg 1$ の場合: このときほとんどすべてのスピンの向きが上向きになり, 素励起はひとつスピンを下向きにしたときにできるマグノンである (ダウンスピンのマグノンと呼ぶことにする). この場合の易動度はアップスピンのマグノンに比べて大きいと予想できる. すなわちこのとき S は $S < 0$ となる. (図 6.8 参照). (ii) $\Delta \gg 1$ かつ $0 < h \ll 1$ の場合: このときほとんどすべてのスピンは, 互い違いに揃う Néel 状態になっていると考えられる. このとき励起としては, アップとダウンの 2 つのスピノンの励起が考えられる. 特に磁場が $h > 0$ のとき, アップのスピノンのほうが, ダウンのそれよりエネルギー的に小さく, これがキャリアーとして輸送を担うと考えることができる. このとき $S > 0$ となる.

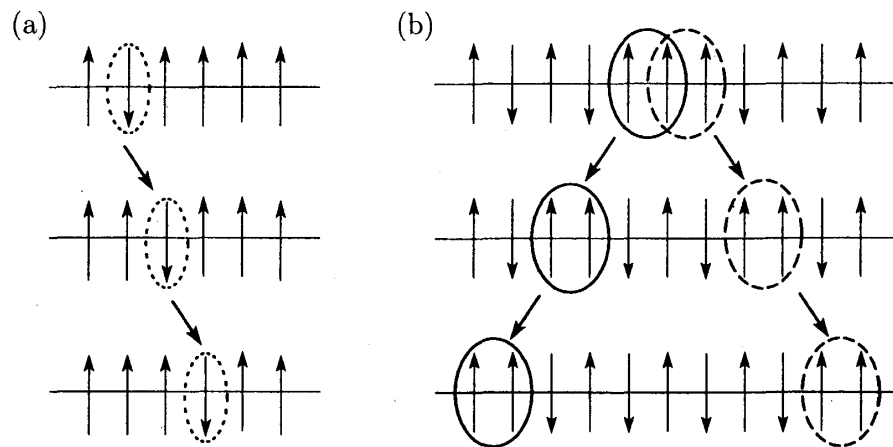


図 6.8: マグノン励起の伝播 (a), 及びスピノン励起の伝播 (b) を模式的に示した図.

(図 6.8 参照). (iii) $T \gg 1$ のとき: このときは相互作用 Δ の存在は無視でき, S の振舞いは, XY 模型の場合で記述される. 従ってこのとき $S < 0$ となる.

$\Delta, T, h \sim 1$ のような現実的なパラメータ領域では, Seebeck 係数 S の符号変化は, 上で述べた極端な場合の機構の競合効果として解釈されるだろう. つまり, $T = T_0$ もしくは $T = T_2$ で起こる符号変化は機構 (ii) と (iii) の競合によるものと解釈されるし, $T = T_1$ で起こる変化は (i) と (ii) の競合によるものと解釈される.

以上述べた磁気熱効果, 特に, 磁氣的 Seebeck 係数の反転現象は, 実験でも測定可能な現象と考えられ, 1次元量子系の特異な輸送特性を実際に観測する上で興味深い.

7 まとめと今後の展望

以上, 本解説では, 1次元量子系の特異な輸送特性を, XXZ 鎖における熱伝導・スピン伝導, そして磁気熱効果に焦点をあてて議論してきた. この系特有の可積分性のため, 輸送を担うカレントが保存量と密接に関連し, それによってスピン伝導や熱伝導など, 輸送特性が弾道的になることを見た. こうした弾道的な輸送特性は, 実際の1次元物質における実験からも観測され, これらの観測結果は系の可積分性の残滓として解釈される. また, 有限磁場下では, 系のスピン反転対称性が破れ, 磁気熱効果が出現する. この効果の大きさを測る量として, 磁氣的 Seebeck 係数が定義される. この磁氣的 Seebeck 係数はまた, 系のキャリアの種類を判別する量ともなり, 我々は, その振る舞いを解析することにより磁場中の輸送特性を論じた. 特に, 反強磁性的な相互作用が存在する場合, 磁氣的 Seebeck 係数の符号が反転する現象を考察した. これは, いわば相互作用・磁場・温度の3つの効果による, スピノンのようなキャリアとマグノンのようなキャリアの交代現象と解釈することができる. この磁氣的 Seebeck 係数の反転現象は, 実際に観測可能な効果と考えられ, 今後の実験が期待される.

最後に, 可積分系における輸送特性から非可積分系における輸送特性へのコメントを短くして

おく。本論でも述べたとおり、現実の1次元物質では、フォノンの効果や不純物との散乱、さらに Heisenberg 相互作用以外の相互作用 (例えば2次元方向の相互作用) の存在等によって、可積分性は壊れている。この効果により、伝導率のデルタ関数的なピーク $\sigma(\omega) = \pi D \delta(\omega)$ は押し広げられ、結果として伝導率は有限になり、かつ有限の線幅を持つようになる (図 4.2 参照)。この有限の伝導率を、可積分系からの摂動論で得ることは一般的には不可能である。なぜなら、上でも述べたとおり、可積分系の伝導率はデルタ関数的であり、これを第ゼロ近似とした摂動論を用いる限り、有限の伝導率を得るには、結局摂動の無限次までの足しあげが必要となるからである。一方、伝導率そのものではなく、緩和時間の逆数に対応する線幅を摂動的に論じることが可能である。すなわち、非可積分的な摂動 $\lambda \mathcal{H}'$ ($\lambda \ll 1$) による線幅 $\delta\omega(\lambda)$ は λ の関数として連続的に変化すると考えられる。この $\delta\omega$ は、伝導率 $\sigma(\omega)$ に対する2次のモーメントで与えることができ

$$\delta\omega \sim \frac{1}{\tau} \sim \frac{\int_{-q}^q \omega^2 \sigma(\omega) d\omega}{\int_{-q}^q \sigma(\omega) d\omega} = \frac{\lambda g^{(1)} + \lambda^2 g^{(2)} + \dots}{\pi D + \lambda f^{(1)} + \lambda^2 f^{(2)} + \dots} = g^{(1)} \frac{\lambda}{\pi D} + \dots$$

と摂動展開が可能となる (q は適当なカットオフ) この緩和時間が何らかの方法により決定できれば、(4.12) 式を通して系の熱伝導率が、フィッティングパラメータなしで評価することができる。

謝辞

この解説を書くにあたり、共同研究者の A. Klümper, 古川俊輔, 池田大の各氏に心より感謝いたします。また、輸送特性に関する有益な議論をしていただいた、押川正毅, 城石正弘, 藤本聡, 前田義高, 前橋英明の各氏にもお礼を申し上げます。最後に本解説の執筆を奨めていただいた笹本智弘氏に感謝いたします。

Appendix A Bethe 仮説法

A.1 代数的 Bethe 仮説法

3章では、量子可積分系の無限個の保存量が、可換な転送行列を母関数として生成されることを見た。ここでは、代数的 Bethe 仮説法と呼ばれる方法によって XXZ 鎖の転送行列を対角化しよう [59]。まずはじめに、(3.15) 式で定義されたモノドロミー行列 $\mathcal{T}_a(v)$ を補助空間 V_a に関して

$$\mathcal{T}(v) = \begin{pmatrix} \mathcal{A}(v) & \mathcal{B}(v) \\ \mathcal{C}(v) & \mathcal{D}(v) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} + \begin{array}{c} \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ | \quad | \quad | \quad | \\ v \quad v \quad v \quad v \\ | \quad | \quad | \quad | \\ 1 \quad 2 \quad \cdots \quad L \end{array} + & - \begin{array}{c} \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ | \quad | \quad | \quad | \\ v \quad v \quad v \quad v \\ | \quad | \quad | \quad | \\ 1 \quad 2 \quad \cdots \quad L \end{array} + \\ + \begin{array}{c} \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ | \quad | \quad | \quad | \\ v \quad v \quad v \quad v \\ | \quad | \quad | \quad | \\ 1 \quad 2 \quad \cdots \quad L \end{array} - & - \begin{array}{c} \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \quad \uparrow \\ | \quad | \quad | \quad | \\ v \quad v \quad v \quad v \\ | \quad | \quad | \quad | \\ 1 \quad 2 \quad \cdots \quad L \end{array} - \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

と 2×2 の行列で表そう。ここで行列の成分 $\mathcal{A}(v), \mathcal{B}(v), \mathcal{C}(v), \mathcal{D}(v)$ はそれぞれ量子空間 $V^{\otimes L}$ に作用する演算子 (つまり、 $2^L \times 2^L$ の行列) である。この表示のもと、転送行列 $T(v)$ は

$$T(v) = \text{Tr}_a \mathcal{T}_a(v) = \mathcal{A}(v) + \mathcal{D}(v) \quad (\text{A.2})$$

と表される. さて, ここで $\mathcal{T}(v)$ をすべてのスピンの上向きになっている状態 $|0\rangle := |++\cdots+\rangle$ (真空と呼ぶ) に作用させてみよう. \mathcal{R} 行列の成分 (3.10) を考慮すると

$$\mathcal{T}(v)|0\rangle = \begin{pmatrix} \mathcal{A}(v)|0\rangle & \mathcal{B}(v)|0\rangle \\ \mathcal{C}(v)|0\rangle & \mathcal{D}(v)|0\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1|0\rangle & \mathcal{B}(v)|0\rangle \\ 0|0\rangle & b^L(v)|0\rangle \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

を得るが, これによって真空 $|0\rangle$ が $T(v)$ の固有状態 $T(v)|0\rangle = (1+b^L(v))|0\rangle$ となっていることがわかるであろう. ここで, $b(v) := \mathcal{R}_{\pm\mp}^{\pm\mp}(v) = [v]/[v+2]$ と略記した. 以下同様に $c(v) := \mathcal{R}_{\mp\pm}^{\mp\pm}(v) = [2]/[v+2]$ と書くことにする. また, $\mathcal{C}(v)|0\rangle = 0$ であり, $\mathcal{B}(v)|0\rangle$ は下向きスピンのひとつ作られた状態となっていることは直接的に確かめられる. 言い換えれば, $\mathcal{B}(v)$ は下向きスピンをひとつ生成する演算子であり, 反対に $\mathcal{C}(v)$ は上向きスピンをひとつ生成する演算子となっているのである. このような, \mathcal{B} を真空に作用させて作られる状態を Bethe 状態とよび, 特に

$$|M\rangle := \mathcal{B}(v_1)\mathcal{B}(v_2)\cdots\mathcal{B}(v_M)|0\rangle, \quad v_j \in \mathbb{C} \quad (\text{A.4})$$

はスピンの m 個下を向いた Bethe 状態である. この Bethe 状態に転送行列 $T(v)$ を作用させてみよう. そのためには $T(v)$ を構成する演算子である $\mathcal{A}(v), \mathcal{D}(v)$ と, Bethe 状態を構成する演算子 $\mathcal{B}(v)$ との交換関係を知っておく必要がある. 実は, この手がかりとなる関係式は, すでに (3.17) 式で与えられている. (A.1) 式を (3.17) 式に代入すれば, 左辺及び右辺からそれぞれ

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_2(v)\mathcal{T}_1(u)\mathcal{R}_{12}(u-v) &= \begin{pmatrix} \mathcal{A}'\mathcal{A} & \mathcal{B}'\mathcal{A} & \mathcal{A}'\mathcal{B} & \mathcal{B}'\mathcal{B} \\ \mathcal{C}'\mathcal{A} & \mathcal{D}'\mathcal{A} & \mathcal{C}'\mathcal{B} & \mathcal{D}'\mathcal{B} \\ \mathcal{A}'\mathcal{C} & \mathcal{B}'\mathcal{C} & \mathcal{A}'\mathcal{D} & \mathcal{B}'\mathcal{D} \\ \mathcal{C}'\mathcal{C} & \mathcal{D}'\mathcal{C} & \mathcal{C}'\mathcal{D} & \mathcal{D}'\mathcal{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & c & 0 \\ 0 & c & b & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathcal{A}'\mathcal{A} & b\mathcal{B}'\mathcal{A} + c\mathcal{A}'\mathcal{B} & b\mathcal{A}'\mathcal{B} + c\mathcal{B}'\mathcal{A} & \mathcal{B}'\mathcal{B} \\ \mathcal{C}'\mathcal{A} & b\mathcal{D}'\mathcal{A} + c\mathcal{C}'\mathcal{B} & b\mathcal{C}'\mathcal{B} + c\mathcal{D}'\mathcal{A} & \mathcal{D}'\mathcal{B} \\ \mathcal{A}'\mathcal{C} & b\mathcal{B}'\mathcal{C} + c\mathcal{A}'\mathcal{D} & b\mathcal{A}'\mathcal{D} + c\mathcal{B}'\mathcal{C} & \mathcal{B}'\mathcal{D} \\ \mathcal{C}'\mathcal{C} & b\mathcal{D}'\mathcal{C} + c\mathcal{C}'\mathcal{D} & b\mathcal{C}'\mathcal{D} + c\mathcal{D}'\mathcal{C} & \mathcal{D}'\mathcal{D} \end{pmatrix}, \\ \mathcal{R}_{12}(u-v)\mathcal{T}_1(u)\mathcal{T}_2(v) &= \begin{pmatrix} \mathcal{A}\mathcal{A}' & \mathcal{A}\mathcal{B}' & \mathcal{B}\mathcal{A}' & \mathcal{B}\mathcal{B}' \\ b\mathcal{A}\mathcal{C}' + c\mathcal{C}\mathcal{A}' & b\mathcal{A}\mathcal{D}' + c\mathcal{C}\mathcal{B}' & b\mathcal{B}\mathcal{C}' + c\mathcal{D}\mathcal{A}' & b\mathcal{B}\mathcal{D}' + c\mathcal{D}\mathcal{B}' \\ b\mathcal{C}\mathcal{A}' + c\mathcal{A}\mathcal{C}' & b\mathcal{C}\mathcal{B}' + c\mathcal{A}\mathcal{D}' & b\mathcal{D}\mathcal{A}' + c\mathcal{B}\mathcal{C}' & b\mathcal{D}\mathcal{B}' + c\mathcal{B}\mathcal{D}' \\ \mathcal{C}\mathcal{C}' & \mathcal{C}\mathcal{D}' & \mathcal{D}\mathcal{C}' & \mathcal{D}\mathcal{D}' \end{pmatrix} \end{aligned}$$

を得る. ここで $b := b(u-v), c := c(u-v), \mathcal{A}' := \mathcal{A}(v), \mathcal{A} := \mathcal{A}(u)$ などの略号を用いた. こうして得られる 16 個の関係式のうち, 後の計算に必要な関係式を抜き出したものが

$$\mathcal{B}(u)\mathcal{B}(v) = \mathcal{B}(v)\mathcal{B}(u), \quad (\text{A.5a})$$

$$\mathcal{A}(u)\mathcal{B}(v) = \frac{1}{b(v-u)}\mathcal{B}(v)\mathcal{A}(u) - \frac{c(v-u)}{b(v-u)}\mathcal{B}(u)\mathcal{A}(v), \quad (\text{A.5b})$$

$$\mathcal{D}(u)\mathcal{B}(v) = \frac{1}{b(u-v)}\mathcal{B}(v)\mathcal{D}(u) - \frac{c(u-v)}{b(u-v)}\mathcal{B}(u)\mathcal{D}(v) \quad (\text{A.5c})$$

である。ここで第 1 式は上式の 1 行 4 列を、第 2 式は 1 行 3 列を、第 3 式は 3 行 4 列から得られる。さて、 $T(v)$ を $|M\rangle$ に作用させ、上の交換関係を使って $\mathcal{A}(v)$ と $\mathcal{D}(v)$ を一番右側に移動させよう。まず、 \mathcal{A} と \mathcal{B} を交換させた際に、 \mathcal{A} と \mathcal{B} のスペクトルパラメーターが交換前と同じ項 ((A.5b) 式第 1 項目) と、交換後で入れ替わる項 (第 2 項目) の 2 つの項が現れることに着目し、

$$\mathcal{A}(v)|M\rangle = \mathcal{A}(v)\mathcal{B}(v_1)\mathcal{B}(v_2)\cdots\mathcal{B}(v_M)|0\rangle = \sum_{j=0}^m M_j \mathcal{B}(v_1)\cdots \underbrace{\mathcal{B}(v)}_{j \text{ 番目}} \cdots \mathcal{B}(v_M)A(v_j)|0\rangle$$

と書く。(A.5b) 式を眺めれば、 M_0 及び M_1 が

$$M_0 = \prod_{k=1}^M \frac{1}{b(v_k - v)}, \quad M_1 = -\frac{c(v_1 - v)}{b(v_1 - v)} \prod_{k=2}^M \frac{1}{b(v_k - v_1)}$$

と書けることは直ちに確かめられるだろう。ところで、(A.5a) 式から \mathcal{B} は異なるスペクトルパラメーターに関して可換であるが、これを用いて $\mathcal{B}(v_j)$ を一番左側に移動させたあとに $\mathcal{A}(v)$ を作用させたとすれば、 M_j は上の M_1 で単に $1 \rightarrow j$ と置き換えたものに過ぎない。すなわち、

$$M_j = -\frac{c(v_j - v)}{b(v_j - v)} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^M \frac{1}{b(v_k - v_j)}$$

と表される。以上の議論と $\mathcal{A}(v)|0\rangle = 1|0\rangle$ (cf. (A.3)) から、結局

$$\mathcal{A}(v)|M\rangle = \prod_{k=1}^M \frac{1}{b(v_k - v)}|M\rangle - \sum_{j=1}^M \frac{c(v_j - v)}{b(v_j - v)} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^M \frac{1}{b(v_k - v_j)} \mathcal{B}(v_1)\cdots \underbrace{\mathcal{B}(v)}_{j \text{ 番目}} \cdots \mathcal{B}(v_M)|0\rangle \quad (\text{A.6})$$

と表される。 $\mathcal{D}(v)|m\rangle$ に関しても、(A.5c) 式を使って同じように考えることができ、

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(v)|M\rangle &= b^L(v) \prod_{k=1}^M \frac{1}{b(v - v_k)}|M\rangle \\ &\quad - \sum_{j=1}^M b^L(v_j) \frac{c(v - v_j)}{b(v - v_j)} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^M \frac{1}{b(v_j - v_k)} \mathcal{B}(v_1)\cdots \underbrace{\mathcal{B}(v)}_{j \text{ 番目}} \cdots \mathcal{B}(v_M)|0\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

が得られる。ここで、 $D(v)|0\rangle = b^L(v)|0\rangle$ (cf. (A.3)) を用いた。(A.6) 式と (A.7) 式を辺々足し合わせたものが求めたい結果であるが、ここでもし (A.6) 式と (A.7) 式の第二項同士が打ち消しあえば、すなわち M 個の未知数 $\{v_j\}$ が方程式 (Bethe 仮説方程式と呼ぶ)

$$b^L(v_j) = \prod_{\substack{k=1 \\ j \neq k}}^M \frac{b(v_j - v_k)}{b(v_k - v_j)} \quad (\text{A.8})$$

の独立な解であれば、Bethe 状態 $|M\rangle$ は転送行列 $T(v)$ の固有状態となり、その固有値 $\Lambda(v)$ は

$$\Lambda(v) = \prod_{k=1}^M \frac{1}{b(v_k - v)} + b^L(v) \prod_{k=1}^M \frac{1}{b(v - v_k)} \quad (\text{A.9})$$

と与えられる¹⁴. $\{v_j\} \rightarrow \{-iv_j - 1\}$ なる変換を行えば, 上の Bethe 仮説方程式は

$$\left(\frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v_j + i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v_j - i)} \right)^L = - \prod_{k=1}^M \frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v_j - v_k + 2i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v_j - v_k - 2i)} \quad (\text{A.10})$$

となり $(\Delta = \cos \gamma)$, $T(v)$ の固有値 $\Lambda(v)$ は, $\Lambda(v) = \tilde{\Lambda}(iv + i)$ として

$$\tilde{\Lambda}(v) = \prod_{k=1}^M \frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v - v_k - 2i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v - v_k)} + \left(\frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v - i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v + i)} \right)^L \prod_{k=1}^M \frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v - v_k + 2i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v - v_k)}. \quad (\text{A.11})$$

この $\Lambda(v)$ を (3.20) 式に代入して $n = 1$ とおけば \mathcal{H}_0 の固有値が得られ, 従って全ハミルトニアン (3.1) のエネルギー固有値 E は

$$E = -2\pi A \sum_{k=1}^M a_1(v_k) - (L/2 - M)h = 2J \sum_{k=1}^M (\cos p_k - \cos \gamma) - (L/2 - M)h, \\ a_n(v) := \frac{\gamma}{2\pi} \frac{\sin n\gamma}{\cosh \gamma v - \cos n\gamma}, \quad e^{ip_k} := \frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v_k + i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v_k - i)} \quad (\text{A.12})$$

と表される. 上の式で定義された p_k は相互作用が繰り込まれた運動量 (擬運動量) である.

ここで本論で必要になるひねり境界条件を課したハミルトニアン (5.3) に対するエネルギー固有値を導出しておこう. これは \mathcal{R} 行列の成分 (3.10) のうち $\mathcal{R}_{\pm\pm}^{\pm\mp}(v)$ を $\mathcal{R}_{\pm\pm}^{\pm\mp}(v) = e^{\mp i \frac{\Phi}{L}} [v]/[v+2]$ と変換したのに対応する (cf. (3.13)). この変換後も \mathcal{R} 行列は Yang-Baxter 方程式 (3.14) を満たし系の可積分性は保たれる. 上と同様の手続きを踏めば, 転送行列の固有値 $\Lambda(v) = \tilde{\Lambda}(iv + i)$ は

$$\tilde{\Lambda}(v) = e^{i \frac{M}{L} \Phi} \prod_{k=1}^M \frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v - v_k - 2i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v - v_k)} + e^{i \frac{L+M}{L} \Phi} \left(\frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v - i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v + i)} \right)^L \prod_{k=1}^M \frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v - v_k + 2i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v - v_k)}$$

となり, 全ハミルトニアンのエネルギー固有値 $E(\Phi)$ は

$$E(\Phi) = -2\pi A \sum_{k=1}^M a_1(v_k(\Phi)) - (L/2 - M)h \quad (\text{A.13})$$

と書ける. ここで未知数 $v_k(\Phi)$ は次式で与えられる Bethe 仮説方程式の解である.

$$\left(\frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v_j(\Phi) + i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v_j(\Phi) - i)} \right)^L = -e^{i\Phi} \prod_{k=1}^M \frac{\sinh \frac{\gamma}{2}(v_j(\Phi) - v_k(\Phi) + 2i)}{\sinh \frac{\gamma}{2}(v_j(\Phi) - v_k(\Phi) - 2i)}. \quad (\text{A.14})$$

A.2 基底状態エネルギー

異方性パラメータが $-1 \leq \Delta = \cos \gamma \leq 1$ ($\gamma \in \mathbb{R}$) にあるときの熱力学的極限 $L \rightarrow \infty$ における基底状態エネルギーを計算しよう. (A.10) 式の両辺の対数を取ると,

$$2L \tan^{-1} \left(\frac{\tanh \frac{\gamma}{2} v_j}{\tan \frac{\gamma}{2}} \right) = 2\pi I_j + 2 \sum_{k=1}^M \tan^{-1} \left(\frac{\tanh \frac{\gamma}{2} (v_j - v_k)}{\tan \gamma} \right) \quad (\text{A.15})$$

¹⁴Bethe 仮説方程式 (A.8) は, 固有値 $\Lambda(v)$ (A.9) が $v = v_j$ で特異点を持たないための条件となる.

である。ここで I_k は m が奇数 (偶数) のとき整数 (半整数) である (L は偶数)。関数 $Z(v)$ を

$$Z(v) := p_1(v) - \frac{1}{L} \sum_{k=1}^M p_2(v - v_k); \quad p_n(v) := 2 \tan^{-1} \left(\frac{\tanh \frac{\gamma}{2} v}{\tan \frac{n\gamma}{2}} \right) \quad (\text{A.16})$$

と定義すると, Bethe 仮説方程式の根 v_j は $Z(v_j) = 2\pi I_j/L$ で決定される。基底状態を与える I_j は, 原点を中心として対称かつ稠密に分布する。すなわち $I_{j+1} - I_j = 1$, $I_1 = -I_M$ を満たす。Fermi 点に対応する根の端点 $v_1 = -Q$, $v_M = Q$ は $Z(-Q) = 2\pi I_1/L$ 及び $Z(Q) = 2\pi I_M/L$ で決定される。 $L \rightarrow \infty$ のとき, v_k に対する分布関数を $\rho(v) = (I_{j+1} - I_j)/(L(v_{j+1} - v_j)) = 1/(L(v_{j+1} - v_j))$ で定義すると¹⁵, (A.15) 式から $\rho(v)$ は線形積分方程式

$$\rho(v) = a_1(v) - \int_{-Q}^Q a_2(v-x)\rho(x)dx \quad (\text{A.17})$$

の解として与えられる。これにより基底状態エネルギー密度 e_0 及び磁化密度 m は, それぞれ

$$e_0 = -2\pi A \int_{-Q}^Q a_1(x)\rho(x)dx - h \left(\frac{1}{2} - \int_{-Q}^Q \rho(x)dx \right), \quad m = \frac{1}{2} - \int_{-Q}^Q \rho(x)dx \quad (\text{A.18})$$

で与えられる。この基底状態エネルギーは

$$\varepsilon(v) = -2\pi A a_1(v) + h - \int_{-Q}^Q a_2(v-x)\varepsilon(x)dx \quad (\text{A.19})$$

で決定される dressed energy (素励起エネルギー) $\varepsilon(v)$ を用いて

$$e_0 = -\frac{h}{2} + \int_{-Q}^Q a_1(x)\varepsilon(x)dx \quad (\text{A.20})$$

とも書ける。与えられた h に対して, Q は e_0 を極小にする条件 $\partial_Q e_0 = 0$ から得られる。すなわち,

$$0 = -2\pi A \left\{ 2a_1(Q)\rho(Q) + \int_{-Q}^Q a_1(x) \frac{d\rho(x)}{dQ} dx \right\} + h \left\{ 2\rho(Q) + \int_{-Q}^Q \frac{d\rho(x)}{dQ} dx \right\} \quad (\text{A.21})$$

から決定される。(A.17) 式の両辺を Q で微分すると

$$\frac{d\rho(v)}{dQ} = -[a_2(v-Q) + a_2(v+Q)]\rho(Q) - \int_{-Q}^Q a_2(v-x) \frac{d\rho(x)}{dQ} dx \quad (\text{A.22})$$

が得られるが, (A.17) 式と組み合わせることによって,

$$\int_{-Q}^Q a_1(x) \frac{d\rho(x)}{dQ} dx = -\rho(Q) \int_{-Q}^Q [a_2(x-Q) + a_2(x+Q)]\rho(x)dx = 2\rho(Q)(\rho(Q) - a_1(Q))$$

が得られる。また, 関数 $\xi(v)$ を

$$\xi(v) = 1 - \int_{-Q}^Q a_2(v-x)\xi(x)dx \quad (\text{A.23})$$

¹⁵ I_j の分布に「欠陥」を入れると, 励起状態が実現される。この欠陥はホールに対応し, その密度を $\rho^h(v)$ とすれば $\sum(I_{j+1} - I_j)/(L(v_{j+1} - v_j)) = \rho(v) + \rho^h(v)$ と表される。

の解として定義すれば¹⁶, これと (A.22) 式から

$$\int_{-Q}^Q \frac{d\rho(x)}{dQ} dx = -\rho(Q) \int_{-Q}^Q [a_2(x-Q) + a_2(x+Q)] \xi(x) dx = 2\rho(Q)(\xi(Q) - 1)$$

が得られる. これらを (A.21) 式に代入すれば, Q は $h = 2\pi A\rho(Q)/\xi(Q)$ の解として与えられる. また, (A.19), (A.20) 式より $\partial_Q e_0 = 0$ は $\varepsilon(\pm Q) = 0$ を与えるが, これは素励起エネルギーが擬 Fermi 点 $\pm Q$ でゼロになることに対応する. なお素励起の速度 v_s は, (A.12), (A.15) 式より運動量密度が $2\pi I_k/L$ の和で表されること, さらに $\rho(v)$ は I_k/L の v_k に関する微分であることから,

$$v_s = \frac{\varepsilon'(Q)}{2\pi\rho(Q)}. \quad (\text{A.24})$$

全スピンの上向きに揃う臨界磁場 h_c では $Q = 0$ であり, $\rho(0) = a_1(0)$, $\xi(0) = 1$ を代入して

$$h_c = 2J(1 + \cos \gamma) = 2J(1 + \Delta). \quad (\text{A.25})$$

$h > h_c$ では, $v_s = 0$ となってギャップが形成され, エネルギーは $e_0 = -h/2$ と自明になる. また, ゼロ磁場では $Q = \infty$ であり, $\rho(v)$ 及び $\varepsilon(v)$ は Fourier 変換で, また, dressed charge $\xi(\infty)$ は Wiener-Hopf 法により求められる. またこのときの v_s は (A.24) 式から求められ, それぞれ

$$\rho(v) = \frac{1}{4 \cosh \frac{\pi}{2} v}, \quad \varepsilon(v) = \frac{-\pi A}{2 \cosh \frac{\pi}{2} v}, \quad \xi(\infty) = \sqrt{\frac{\pi}{2(\pi - \gamma)}}, \quad v_s = \frac{\pi J \sin \gamma}{\gamma}, \quad \text{for } h = 0 \quad (\text{A.26})$$

で与えられる. これをエネルギーの表式に代入すれば, ゼロ磁場での基底状態エネルギー e_0 は

$$e_0 = -2\pi A \int_{-\infty}^{\infty} a_1(x) \rho(x) dx = -J \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2 \cosh \frac{\pi}{2} x} \left\{ \frac{\sin^2 \gamma}{\cosh \gamma x - \cos \gamma} \right\} dx, \quad \text{for } h = 0. \quad (\text{A.27})$$

(ii) $\Delta > 1$, $J > 0$ の場合

$\Delta > 1$, $J > 0$ の場合は, $\gamma \rightarrow i\gamma$ と置き換えることによって, 同様な議論が展開できる. ただし, 周期性のため Q の範囲に制限が付き $Q \in [-\pi/\gamma, \pi/\gamma]$ となる [53]. 結果をまとめると,

$$e_0 = \begin{cases} -J \int_{-\frac{\pi}{\gamma}}^{\frac{\pi}{\gamma}} \frac{\gamma}{\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik\gamma x}}{2 \cosh k\gamma} \left\{ \frac{\sinh^2 \gamma}{\cosh \gamma - \cos \gamma x} \right\} dx & \text{for } 0 \leq h \leq h_{c1} \\ -\frac{h}{2} + \int_{-Q}^Q \tilde{a}_1(x) \tilde{\varepsilon}(x) dx & \text{for } h_{c1} \leq h < h_{c2} \\ -\frac{h}{2} & \text{for } h_{c2} < h \end{cases}$$

$$h_{c1} = 4J \sinh \gamma \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{(-1)^k}{2 \cosh k\gamma}, \quad h_{c2} = 2J(1 + \cosh \gamma) = 2J(1 + \Delta)$$

となる. ここで記号 \sim は, 変換 $\gamma \rightarrow i\gamma$ を意味し, 例えば

$$\tilde{A} = A|_{\gamma \rightarrow i\gamma} = \frac{2J \sinh \gamma}{\gamma}, \quad \tilde{a}_n(v) = a_n(v)|_{\gamma \rightarrow i\gamma} = \frac{\gamma}{2\pi \cosh \gamma - \cos \gamma v} \quad (\text{A.28})$$

を表す. $0 \leq h < h_{c1}$ のとき, 系の磁化はゼロであり, 基底状態と励起状態の間に有限のギャップが存在する. また $h_{c2} \leq h$ のとき, すべてのスピンの上向きになった強磁性状態となる.

¹⁶ $\xi = \xi(\pm Q)$ を dressed charge と呼ぶ.

A.3 熱力学的 Bethe 仮説法

$-1 \leq \Delta \leq 1$ の領域にある XXZ 鎖の有限温度理論を, Yang, Gaudin, 高橋らによる熱力学的 Bethe 仮説法 [53] を用いて展開しよう. ここでは簡単のため $\nu = \pi/\gamma \in \mathbb{Z}_{\geq 2}$ の場合を考察する.

原理的には, (A.10) あるいは (A.15) 式で与えられる Bethe 仮説方程式をあらゆる量子数 I_k の組に対して解いて, (A.12) 式に基づきエネルギー固有値を求め, それらを足し合わせれば熱力学量が求められるが, 実際問題としてこれを実行することは不可能である. Gaudin, 高橋らは, Bethe 仮説方程式の根に以下で述べるある種の仮定をおくことによりこの困難を巧妙に克服した.

(A.10) 式両辺の複素共役を取ってみるとわかるが, 一般に Bethe 仮説方程式の根は実軸対称に分布する. 熱力学的極限における根の形として, 共通の実部を持ち虚軸方向に等間隔に並ぶ「ストリング」を仮定し, さらに $\nu = \pi/\gamma \in \mathbb{Z}_{\geq 2}$ の場合, 取り得るストリングとして

$$\begin{aligned} v_{j,p_\alpha}^{n_\alpha, \delta} &= v_j^\alpha + (n_\alpha + 1 - 2\delta)i, \quad \delta = 1, 2, \dots, n_\alpha; \quad n_\alpha = \alpha = 1, 2, \dots, \nu - 1, \\ v_{j,p_\nu}^{n_\nu, \delta} &= v_j^\nu + \nu i, \quad \delta = 1; \quad n_\nu = 1 \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

を仮定する. ここで, $v_j^\alpha \in \mathbb{R}$ は, 長さ n_α のストリング (n_α ストリングと呼ぶ) の実部である. また, $p_\alpha = \pm$ は「パリティー」であり, $\alpha = 1, 2, \dots, \nu - 1$ のときパリティーは偶 ($p_\alpha = +$), $\alpha = \nu$ のときパリティーは奇 ($p_\nu = -$) とする.

Bethe 仮説方程式 (A.10) の根 v_j として, n_α ストリングに属する根 $v_j = v_{j,p_\alpha}^{n_\alpha, \delta}$ を代入し, δ に関して積を取る. さらにその両辺の対数をとれば, v_j^α に対する次の方程式を得る.

$$L t_\alpha(v_j^\alpha) = 2\pi I_j^\alpha + \sum_{\beta=1}^{\nu} \sum_{k=1}^{M_\beta} \Theta_{\alpha\beta}(v_j^\alpha - v_k^\beta), \quad j = 1, 2, \dots, M_\alpha. \quad (\text{A.30})$$

ただし, M_α は n_α ストリングの数であり,

$$\begin{aligned} \Theta_{\alpha\beta}(v) &= f(v; |n_\alpha - n_\beta|, p_\alpha p_\beta) + f(v; n_\alpha + n_\beta, p_\alpha p_\beta) + 2 \sum_{\iota=1}^{\min(n_\alpha, n_\beta)-1} f(v; |n_\alpha - n_\beta| + 2\iota, p_\alpha p_\beta), \\ t_\alpha(v) &:= f(v; n_\alpha, p_\alpha); \quad f(v; n, p) = \begin{cases} 2p \tan^{-1} \left\{ (\cot \frac{n\pi}{2\nu})^p \tanh \frac{\pi v}{2\nu} \right\} & \text{for } n/\nu \notin \mathbb{Z}, \\ 0 & \text{for } n/\nu \in \mathbb{Z} \end{cases} \end{aligned}$$

である. また, I_j^α は M_α が奇数 (偶数) のとき整数 (半整数) となる ($M_2 = M_3 = \dots = M_\nu = 0$ と置いたとき, (A.15) 式が再現されることに注意してほしい). (A.16) 式に対応して,

$$Z_\alpha(v) = t_\alpha(v) - \frac{1}{L} \sum_{\beta=1}^{\nu} \sum_{k=1}^{M_\beta} \Theta_{\alpha\beta}(v - v_k^\beta) \quad (\text{A.31})$$

を定義すると, $Z_\alpha(v_j^\alpha) = 2\pi I_j^\alpha / L$ である. 基底状態との類似 (脚注 15 参照) から, 熱力学的極限 $L \rightarrow \infty$ において, $\sum_{j=1}^{M_\alpha} (I_{j+1}^\alpha - I_j^\alpha) / (L(v_{j+1}^\alpha - v_j^\alpha)) = Z'(v)$ は n_α ストリングの密度 $\rho_\alpha(v)$ と, n_α ストリングに対するホール密度 $\rho_\alpha^h(v)$ の和を表す. すなわち,

$$Z'_\alpha(v) = 2\pi(-1)^{\delta_{\alpha\nu}} (\rho_\alpha(v) + \rho_\alpha^h(v)); \quad \lim_{L \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^{M_\alpha} \frac{1}{L(v_{j+1}^\alpha - v_j^\alpha)} = \rho_\alpha(v). \quad (\text{A.32})$$

(A.30), (A.32) 式より, $L \rightarrow \infty$ において

$$a(v, \alpha) = (-1)^{\delta_{\alpha\nu}} (\rho_\alpha(v) + \rho_\alpha^h(v)) + \sum_{\beta=1}^{\nu} T_{\alpha\beta} * \rho_\beta[v] \quad (\text{A.33})$$

を得る. 上式で

$$a(v, \alpha) := \frac{1}{2\pi} \partial_v t_\alpha(v) = \frac{\gamma}{2\pi \cosh \gamma v - (-1)^{\delta_{\alpha\nu}} \cos n_\alpha \gamma}, \quad T_{\alpha\beta} = \frac{1}{2\pi} \partial_v \Theta_{\alpha\beta}(v)$$

であり, 記号 $*$ は畳み込み $f * g[v] = \int_{-\infty}^{\infty} f(v-x)g(x)dx$ を意味する.

さて, 熱力学的極限において実現される根の分布は (A.33) 式に加え, 系の自由エネルギーを最小にする条件から得られる. このためには, エネルギーとエントロピーを分布関数 $\rho_\alpha(v)$, $\rho_\alpha^h(v)$ により表す必要がある. (A.12), (A.29) 式より, エネルギー密度 $e := E/L$ は $L \rightarrow \infty$ で

$$e = -\frac{h}{2} - \frac{2\pi A}{L} \sum_{j=1}^M a_1(v_j) + mh = -\frac{h}{2} + \sum_{\alpha=1}^{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} (-2\pi A a(v, \alpha) + n_\alpha h) \rho_\alpha(v) dv \quad (\text{A.34})$$

と書ける (m : 磁化密度). 一方, エントロピー密度 s は次のようにして評価される. 微小区間 dv には, n_α スtring (粒子) 及びホールがそれぞれ $\rho_\alpha(v)dv$, $\rho_\alpha^h(v)dv$ 個存在する. n_α スtring が取りうる状態数は, $\rho_\alpha(v) + \rho_\alpha^h(v)$ の箱に, 重複を許さずに $\rho_\alpha(v)$ 個の粒子を入れる方法の数だけ存在し, それは $[\rho_\alpha(v) + \rho_\alpha^h(v)dv]! / ([\rho_\alpha(v)dv]! [\rho_\alpha^h(v)dv]!)$ 通りある. 従って, 全エントロピー密度 s は,

$$\begin{aligned} s &= \sum_{\alpha=1}^{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} [\{\rho_\alpha(v) + \rho_\alpha^h(v)\} \ln \{\rho_\alpha(v) + \rho_\alpha^h(v)\} - \rho_\alpha(v) \ln \rho_\alpha(v) - \rho_\alpha^h(v) \ln \rho_\alpha^h(v)] dv \\ &= \sum_{\alpha=1}^{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \rho_\alpha(v) \ln \left(1 + \frac{\rho_\alpha^h(v)}{\rho_\alpha(v)} \right) + \rho_\alpha^h(v) \ln \left(1 + \frac{\rho_\alpha(v)}{\rho_\alpha^h(v)} \right) \right\} dv \end{aligned}$$

となる. 実現する分布 $\rho_\alpha(v)$, $\rho_\alpha^h(v)$ は自由エネルギー密度 $f = e - Ts$ を最小にすることから

$$\begin{aligned} 0 = \delta(e - Ts) &= \sum_{\alpha=1}^{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \left[(-2\pi A a(v, \alpha) + n_\alpha h) \delta \rho_\alpha(v) \right. \\ &\quad \left. - T \left\{ \delta \rho_\alpha(v) \ln \left(1 + \frac{\rho_\alpha^h(v)}{\rho_\alpha(v)} \right) + \delta \rho_\alpha^h(v) \ln \left(1 + \frac{\rho_\alpha(v)}{\rho_\alpha^h(v)} \right) \right\} \right] dv \end{aligned}$$

が得られ, (A.33) 式の変分を取って $\delta \rho^h$ を $\delta \rho$ で置き換えたものを上式に代入すると,

$$\ln \eta_\alpha(v) = -\beta \{ 2\pi A a(v, \alpha) - n_\alpha h \} + \sum_{\beta=1}^{\nu} (-1)^{\delta_{\beta\nu}} T_{\alpha\beta} * \ln(1 + \eta_\beta^{-1})[v], \quad \eta_\alpha(v) := \frac{\rho_\alpha^h(v)}{\rho_\alpha(v)} \quad (\text{A.35})$$

を得る. これと (A.33) 式より, 自由エネルギーは次式で与えられる. f は,

$$f = -\frac{h}{2} - T \sum_{\alpha=1}^{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} (-1)^{\delta_{\alpha\nu}} a(v, \alpha) \ln(1 + \eta_\alpha(v)^{-1}) dv.$$

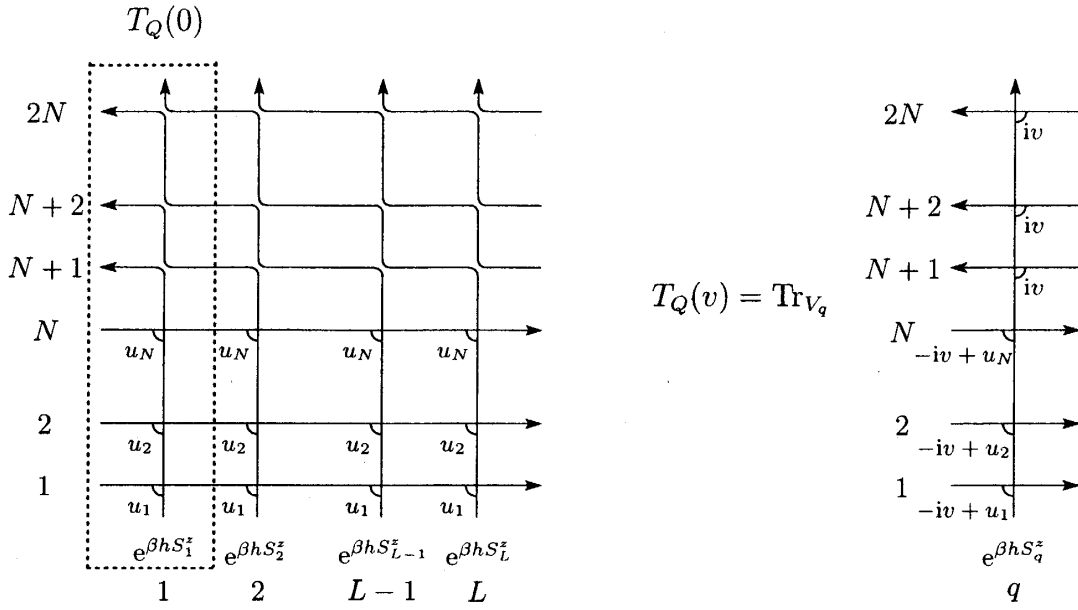


図 7.1: 左: XXZ 鎖の分配関数 $Z(B.1)$ を図式的に表したものの。この 2 次元格子には周期的境界条件が課せられている。右: 量子転送行列 $T(v)$ 。左図点線内で定義される量子転送行列にスペクトルパラメーター v を付加してある。

Appendix B 量子転送行列法

XXZ 鎖の有限温度理論を、前節の熱力学的 Bethe 仮説法とは異なる方法で展開しよう。XXZ 鎖は (3.19) 式によって 6 頂点模型の転送行列と関係付けられる。この転送行列を用いれば、XXZ 鎖の分配関数 $Z := \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H})$ は

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}_{V^{\otimes L}} e^{\beta h \mathcal{H}} \left\{ 1 - \frac{\beta}{N} \mathcal{H}_0 + O(N^{-2}) \right\}^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}_{V^{\otimes L}} e^{\beta h \mathcal{H}} T(0)^{-N} \prod_{j=1}^N T(u_j),$$

$$u_1 = u_2 = \cdots = u_N = u_0 := -\frac{\beta A}{N}, \quad A = \frac{2J \sin \gamma}{\gamma} \quad (B.1)$$

と表される (図 7.1)。ここで、(3.19) 式により $T(0)^{-1} T(u_j) = 1 + u_j \mathcal{H}_0 / A + O(u_j^2)$ と展開されることを用いた。一般に (B.1) 式に現れる $T(0)^{-1} T(u_j)$ の固有値は熱力学的極限 $L \rightarrow \infty$ において無限に縮退している。つまり、分配関数を (B.1) 式に基づいて評価するためには、転送行列のすべての固有値を足し上げなければならない。この足し合わせの問題を回避する手段のひとつが以下に述べる量子転送行列法である [53, 60]。

図 7.1 にあるように、視点を 90° 変えて、補助空間 $V^{\otimes 2N}$ に作用する行列 (量子転送行列と呼ぶ) $T_Q \in \text{End}(V^{\otimes 2N} \otimes V^{\otimes 2N})$ を定義すれば¹⁷、分配関数 Z はこの T_Q を実空間方向に L 回作用させたもの、すなわち $Z = \lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}_{V^{\otimes 2N}} T_Q^L$ と再解釈される。実はこの量子転送行列の最大固有値はただひとつであり、他の固有値との間には有限のギャップが存在する [61, 62]。さら

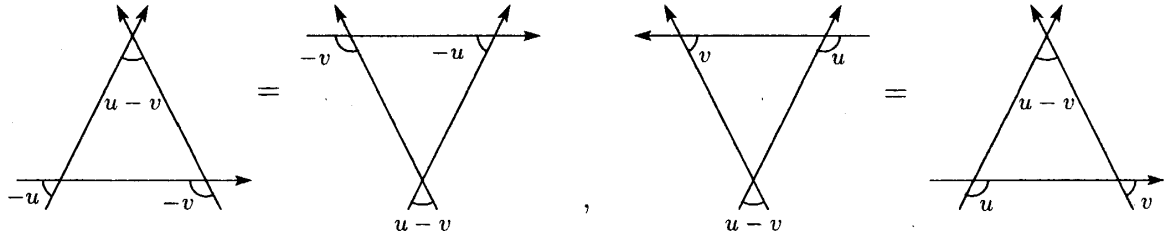
¹⁷ N を Trotter 数と呼ぶ。

に, 2つの極限 $L \rightarrow \infty$, $N \rightarrow \infty$ の順序は交換可能であること [61] を用いれば, 上式は

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \Lambda_Q^{\max} \quad (\text{B.2})$$

となって, 系の熱力学量は量子転送行列の最大固有値 Λ_Q^{\max} で記述される.

さて, 再び可積分性の登場である. Yang-Baxter 方程式 (3.14) で両辺を左回りに 30° 回転させ, $u \rightarrow -v, v \rightarrow u - v$ と変換したものと, 両辺を左回りに 90° 回転させたものはそれぞれ



で表される. こうして得られた, Yang-Baxter 方程式を用いれば, 図 7.1 のようにスペクトルパラメーターを付加した $T_Q(v)$ は, 異なるスペクトルパラメーターに関して可換, すなわち

$$[T_Q(u), T_Q(v)] = 0 \quad (\text{B.3})$$

となることが示される. 可換性 (B.3) によって Appendix A で述べた代数的 Bethe 仮説法が量子転送行列の場合にもそのまま適用できる. ただしここでの真空状態は, 図 7.1 において 1 から N までは $+$, N から $2N$ までは $-$ とした状態で定義される. 最終的に量子転送行列の固有値 $\Lambda_Q(v)$ は

$$\Lambda_Q(v) = \underbrace{\frac{\varphi(v)}{\varphi(v-2i)} \frac{q(v-2i)}{q(v)} e^{\frac{\beta h}{2}}}_{=:\lambda_1(v)} + \underbrace{\frac{\varphi(v+iu_0)}{\varphi(v+i(u_0+2))} \frac{q(v+2i)}{q(v)} e^{-\frac{\beta h}{2}}}_{=:\lambda_2(v)},$$

$$\varphi(v) := \left\{ \sinh \frac{\gamma}{2} v \right\}^N, \quad q(v) := \prod_{j=1}^n \sinh \frac{\gamma}{2} (v - v_j) \quad (\text{B.4})$$

と表される. ここで, u_1, \dots, u_N は (B.1) 式にあるようにすべて同じ値 u_0 を取るものとし, また, n 個の未知数 $\{v_j\}$ は Bethe 仮説方程式

$$\frac{\varphi(v_k) \varphi(v_k + i(u_0 + 2))}{\varphi(v_k + iu_0) \varphi(v_k - 2i)} e^{\beta h} = \frac{q(v_k + 2i)}{q(v_k - 2i)} \quad (\text{B.5})$$

によって決定される. 実際の最大固有値は, (B.5) において, $n = N$ とし, 分布が虚軸対称になる解によって与えられる (図 7.2). N が有限の場合には, このように Bethe 仮説方程式を直接解くことによって Λ_Q^{\max} を求めることができるが, 最終的に我々が求めたいのは Trotter 極限 $N \rightarrow \infty$ の場合である. これを $\Lambda_Q(v)$ の解析的な性質を調べることによって解決しよう. 固有値 $\Lambda_Q(v)$ は, 虚軸方向に周期性 $\Lambda_Q(v + 2\gamma/\pi i) = \Lambda_Q(v)$ を持つため, 以下 $\text{Im } v \in [-\pi/\gamma, \pi/\gamma]$ の範囲で考えれば十分である.

Bethe 仮説方程式 (B.5) のもと, 固有値 $\Lambda_Q(v)$ は $2N$ 個の極 ($v = 2i$ 及び $v = -i(u_0 + 2)$ にそれぞれ N 位の極) と $2N$ 個のゼロ点 $\{v_j^h\}$ ($j = 1, 2, \dots, 2N$) を持ち, 従って

$$\Lambda_Q(v) = \frac{q^h(v)}{\varphi(v-2i)\varphi(v+i(u_0+2))}, \quad q^h(v) = 2 \cosh \frac{\beta h}{2} \prod_{j=1}^{2N} \sinh \frac{\gamma}{2} (v - v_j^h) \quad (\text{B.6})$$

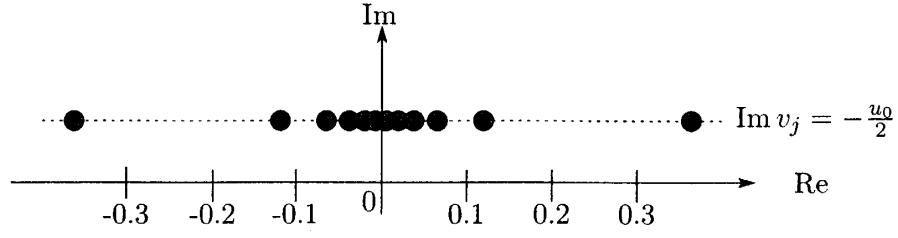


図 7.2: 量子転送行列の最大固有値を与える, Bethe 仮説方程式の根 $\{v_j\}$ の分布 ($\gamma = \pi/3$; $\Delta = \cos \gamma = 1/2$, $N = 12$, $u_0 = -0.1$, $h = 0$ の場合). 根は虚軸に対して対称に分布し, 特に $h = 0$ の場合, $\text{Im } v = -u_0/2$ の直線上に分布する.

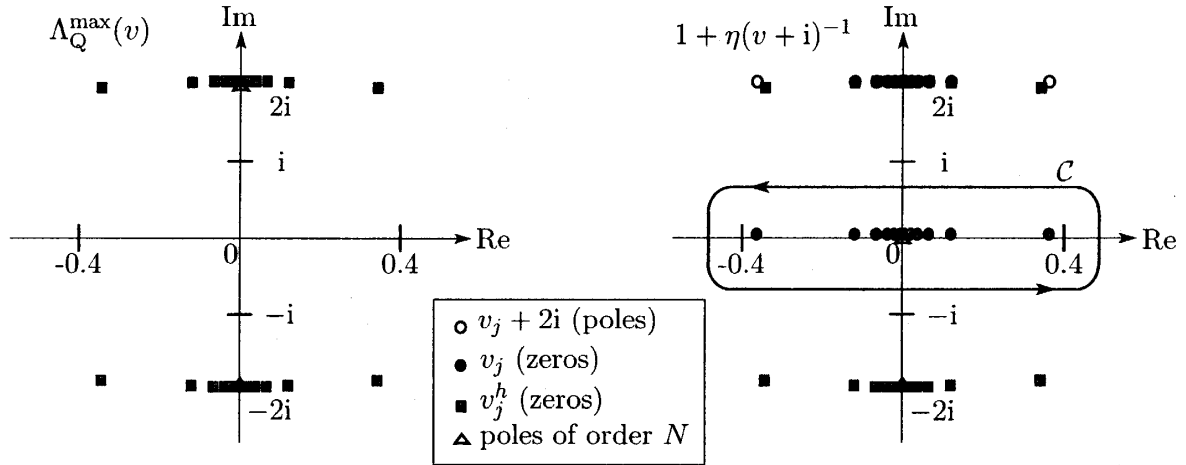


図 7.3: 量子転送行列の最大固有値 $\Lambda_Q^{\max}(v)$ (左図) と $1 + \eta(v+i)^{-1}$ (B.7)(右図) のゼロ点と極の分布 ($\gamma = \pi/3$; $\Delta = \cos \gamma = 1/2$, $N = 12$, $u_0 = -0.1$, $h = 0$ の場合). 相互作用を $|\Delta| \leq 1$ の範囲で変えても同様の分布を持つ.

と書くことができる. 特に最大固有値 $\Lambda_Q^{\max}(v)$ の場合, 図 7.3 にあるように, $\{v_j^h\}$ は $\text{Im}(v) = \pm 2$ 付近にそれぞれ N 個ずつ分布する. 以下, この最大固有値の場合に関して議論を進めよう.

さて, ゼロ点 $\{v_j^h\}$ と Bethe 仮説方程式の根 $\{v_j\}$ を記述するために補助関数

$$\eta(v) := \frac{\lambda_1(v-i)}{\lambda_2(v-i)} = \frac{\varphi(v-i)\varphi(v+i(u_0+1))}{\varphi(v-3i)\varphi(v+i(u_0-1))} \frac{q(v-3i)}{q(v+i)} e^{\beta h},$$

$$1 + \eta(v+i)^{-1} = \frac{\lambda_1(v) + \lambda_2(v)}{\lambda_1(v)} = \frac{q^h(v)}{\varphi(v)\varphi(v+i(u_0+2))} \frac{q(v)}{q(v-2i)} e^{-\frac{\beta h}{2}} \quad (\text{B.7})$$

を導入しよう. 図 7.3 に $1 + \eta(v+i)^{-1}$ のゼロ点と極の分布を示した. このゼロ点と極の分布から,

積分路 C を図 7.3 のように取り, 部分積分と Cauchy の積分定理を用いると

$$\ln \frac{q(v)}{\varphi(v)} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{\gamma \cosh \frac{\gamma}{2}(v-x)}{2 \sinh \frac{\gamma}{2}(v-x)} \ln(1 + \eta(x+i)^{-1}) dx + \begin{cases} 0 & \text{for } v \text{ outside } C \\ \ln(1 + \eta(v+i)^{-1}) & \text{for } v \text{ inside } C \end{cases} \quad (\text{B.8})$$

となる. 従って, $\eta(v)$ は非線形積分方程式

$$\ln \eta(v) = \ln \left(\frac{\varphi(v-i)\varphi(v+i(1+u_0))}{\varphi(v+i)\varphi(v-i(1-u_0))} \right) + \beta h + \oint_C a_2(v-x-i) \ln(1 + \eta(x+i)^{-1}) dx \quad (\text{B.9})$$

の解として与えられる. $\text{Im } v \in [0, 2]$ とし, 積分路 C の虚部は図のように $[-1, 1]$ の範囲内にあるとする. また, $a_2(v)$ は (A.12) 式で定義される. この積分方程式において Trotter 極限 $N \rightarrow \infty$ は解析的に取ることができ, 上式 (B.9) は

$$\ln \eta(v) = -2\pi\beta A a_1(v) + \beta h + \oint_C a_2(v-x-i) \ln(1 + \eta(x+i)^{-1}) dx, \quad A = \frac{2J \sin \gamma}{\gamma} \quad (\text{B.10})$$

と書き換えられる. 図 7.3 の C を通る積分には, 積分路の外側にある極とゼロ点が寄与すると考えると, Cauchy の定理により

$$\partial_v \ln \frac{q^h(v)}{q(v-2i)\varphi(v+i(u_0+2))} = -\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{\gamma \cosh \frac{\gamma}{2}(v-x)}{2 \sinh \frac{\gamma}{2}(v-x)} \partial_x \ln(1 + \eta(x+i)^{-1}) dx + \begin{cases} 0 & \text{for } v \text{ inside } C \\ \partial_v \ln(1 + \eta(v+i)^{-1}) & \text{for } v \text{ outside } C \end{cases} \quad (\text{B.11})$$

とすることができる. これと, (B.8) 及び (B.6) 式から

$$\ln \Lambda_Q^{\max}(v) = \frac{\beta h}{2} + \oint_C a_1(v-x-i) \ln(1 + \eta(x+i)^{-1}) dx \quad (\text{B.12})$$

が得られる. ここで, $v \in \mathbb{R}$ とし, 積分定数である $\beta h/2$ は $v \rightarrow \infty$ としたときの値 ($\Lambda_Q^{\max}(\infty) = 2 \cosh(\beta h/2)$, $1 + \eta(\infty)^{-1} = 2e^{-\beta h/2} \cosh(\beta h/2)$) から決定される.

上の議論で XXZ 鎖の分配関数が定式化されたが (cf. (B.2)), (3.6) あるいは (3.7) 式で与えられる熱的 Drude 重み D_Q を計算するためにはエネルギー流 \mathcal{J}_E の有限温度相関 $\langle \mathcal{J}_E^2 \rangle$ を求めなければならない. このため (B.1) 式で与えられる分配関数 Z を

$$Z^{(n)}(\lambda_0, \lambda_1) = \text{Tr } e^{-\beta(\lambda_0 \mathcal{H}_0 - h \mathcal{H} + \lambda_1 \mathcal{J}^{(n)})} \quad (\text{B.13})$$

と拡張したものを考えよう. 特に, (3.21) 式で与えられるように, エネルギー流 \mathcal{J}_E は XXZ 鎖の非自明な保存量の組 $\{\mathcal{J}^{(n)}\}$ (3.20) のひとつ $\mathcal{J}^{(2)}$ で与えられることに注意してほしい. (B.1) 式は

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr } e^{\beta h \mathcal{H}} \exp \left[-N \ln T(0) + \sum_{j=1}^N \ln T(u_j) \right]$$

と書ける. そこで任意の関数 $f(v, u_j)$ において

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^N [f(u_j) - f(0)] = -\beta [\lambda_0 A \partial_u + \lambda_1 (-i)^{n-1} (A \partial_u)^n] f(u) \Big|_{u=0} \quad (\text{B.14})$$

となるような $\{u_j\}$ を適当に選べば $Z^{(n)}$ が実現される. ここで (3.20) 式を考慮した. 以下の議論では $\{u_j\}$ の存在そのものが重要であって, 具体的な $\{u_j\}$ の値は必要ない. このような $\{u_j\}$ を選んだことで変更される箇所は, (B.9) 式で u_0 に陽に依存する項 (driving term) のみであり, それは

$$\sum_{j=1}^N [f(u_0) - f(0)] \rightarrow \sum_{j=1}^N [f(u_j) - f(0)], \quad f(u) = \ln \left(\frac{\varphi(v + i(1+u))}{\varphi(v - i(1-u))} \right)$$

と置き換えられる. Trotter 極限 (B.14) を取れば, 非線形積分方程式 (B.10) は

$$\ln \eta(v) = \psi(v) + \oint_C a_2(v-x-i) \ln(1+\eta(x+i)^{-1}) dx \quad (\text{B.15})$$

と書き換えられる. ここで $\psi(v)$ を

$$\psi(v) := -2\pi\beta A \left[\lambda_0 + \lambda_1 (A \partial_v)^{n-1} \right] a_1(v) + \beta h$$

とした. この方程式の解 $\eta(v)$ を (B.12) 式に代入すれば, 一般化された分配関数 $Z^{(n)}$ は

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln Z^{(n)}(\lambda_0, \lambda_1) = \ln \Lambda_Q^{\max}(0) = \frac{\beta h}{2} + \oint_C a_1(x+i) \ln(1+\eta(x+i)^{-1}) dx \quad (\text{B.16})$$

と与えられる. ここまでは $-1 \leq \Delta = \cos \gamma \leq 1$ の無質量領域で議論したが, $\gamma \rightarrow i\gamma$ と変換すればそのまま $|\Delta| > 1$ の領域に適用できる.

最後に, 実際の数値解析や, 第4章で行うゼロ磁場での熱的 Drude 重みの低温極限における解析に便利になるように, (B.15) 及び (B.16) 式を書き換えておこう.

(i) $-1 \leq \Delta = \cos \gamma \leq 1$ の場合

まず, 異方性パラメータ Δ が $-1 \leq \Delta = \cos \gamma \leq 1$ をとる場合を考えよう. (B.15) 式を

$$\ln \eta(v) = \psi(v) + \int_{-\infty}^{\infty} a_2(v-x) \ln(1+\eta(x)^{-1}) dx - \int_{-\infty}^{\infty} a_2(v-x-2i) \ln(1+\eta(x+2i)^{-1}) dx \quad (\text{B.17})$$

のように書き換え, $\eta(v)$ 及び $\eta(v+2i)$ の2つの関数に関する連立非線形積分方程式とみなす. このとき量子転送行列の固有値 (B.16) は

$$\ln \Lambda_Q^{\max}(v) = \frac{\beta h}{2} + \int_{-\infty}^{\infty} a_1(v-x) \ln(1+\eta(x)^{-1}) dx - \int_{-\infty}^{\infty} a_1(v-x-2i) \ln(1+\eta(x+2i)^{-1}) dx \quad (\text{B.18})$$

と表される. ここで, $v \in \mathbb{R}$ である. $\mathbf{a}(v) := 1/\eta(v+2i)$, $\bar{\mathbf{a}}(v) := \eta(v)$ として, Fourier 変換を用いて (B.17) 式を $\mathbf{a}(v)$, $\bar{\mathbf{a}}(v)$ に関して表すと

$$\begin{aligned}\ln \mathbf{a}(v) &= -\beta \left\{ \lambda_0 + \lambda_1 (A \partial_v)^{n-1} \right\} \epsilon(v) - \frac{\pi h \beta}{2(\pi - \gamma)} + \kappa * \ln \mathfrak{A}[v] - \kappa * \ln \bar{\mathfrak{A}}[v+2i - \delta i], \\ \ln \bar{\mathbf{a}}(v) &= -\beta \left\{ \lambda_0 + \lambda_1 (A \partial_v)^{n-1} \right\} \epsilon(v) + \frac{\pi h \beta}{2(\pi - \gamma)} + \kappa * \ln \bar{\mathfrak{A}}[v] - \kappa * \ln \mathfrak{A}[v-2i + \delta i], \\ \mathfrak{A}(v) &:= 1 + \mathbf{a}(v); \quad \bar{\mathfrak{A}}(v) := 1 + \bar{\mathbf{a}}(v)\end{aligned}\tag{B.19}$$

ただし, 記号 $*$ は畳み込み $f * g[v] := \int_{-\infty}^{\infty} f(v-x)g(x)dx$ を意味し, $\delta \ll 1$ は微小な正数とする. また, $\kappa(v)$, $\epsilon(v)$ 等は

$$\kappa(v) := \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sinh\left(\frac{\pi}{\gamma} - 2\right) k e^{ikv}}{2 \cosh k \sinh\left(\frac{\pi}{\gamma} - 1\right) k} dv, \quad \epsilon(v) := \frac{\pi A}{2 \cosh \frac{\pi}{2} v}, \quad A = \frac{2J \sin \gamma}{\gamma}$$

で与えられる. これに対応して (B.18) 式は

$$\ln \Lambda_Q^{\max}(v) = \beta(\lambda_0 + \lambda_1 (A \partial_v)^{n-1}) \mathcal{E}(v) + \frac{1}{2\pi A} (\epsilon * \ln \mathfrak{A}[v] + \epsilon * \ln \bar{\mathfrak{A}}[v])\tag{B.20}$$

と書ける. ここで $\mathcal{E}(v)$ は

$$\mathcal{E}(v) = - \int_{-\infty}^{\infty} \epsilon(v-x) a_1(x) dx.\tag{B.21}$$

(ii) $\Delta > 1$, $J > 0$ (反強磁性領域) の場合

次に $\Delta = \cosh \gamma > 1$ かつ $J > 0$ にある反強磁性領域を考えよう. これは (B.17) 式及び (B.18) 式において, $\gamma \rightarrow i\gamma$ と変換し, さらに積分区間を $[-\infty, \infty]$ から $[-\pi/\gamma, \pi/\gamma]$ に変更したものに相当する. 無質量領域と同様に $\mathbf{b}(v) := 1/\eta(v+2i)$, $\bar{\mathbf{b}}(v) := \eta(v)$, 等と置き換えると, これらは

$$\begin{aligned}\ln \mathbf{b}(v) &= -\beta \left\{ \lambda_0 + \lambda_1 (\tilde{A} \partial_v)^{n-1} \right\} \epsilon_{\text{af}}(v) - \frac{\beta h}{2} + \kappa_{\text{af}} * \ln \mathfrak{B}[v] - \kappa_{\text{af}} * \ln \bar{\mathfrak{B}}[v+2i - \delta i], \\ \ln \bar{\mathbf{b}}(v) &= -\beta \left\{ \lambda_0 + \lambda_1 (\tilde{A} \partial_v)^{n-1} \right\} \epsilon_{\text{af}}(v) + \frac{\beta h}{2} + \kappa_{\text{af}} * \ln \bar{\mathfrak{B}}[v] - \kappa_{\text{af}} * \ln \mathfrak{B}[v-2i + \delta i], \\ \mathfrak{B}(v) &:= 1 + \mathbf{b}(v); \quad \bar{\mathfrak{B}}(v) := 1 + \bar{\mathbf{b}}(v)\end{aligned}\tag{B.22}$$

の解として与えられる. ここで, $f * g[v] := \int_{-\pi/\gamma}^{\pi/\gamma} f(v-x)g(x)dx$ であり, また

$$\kappa_{\text{af}}(v) := \frac{\gamma}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\gamma|k|}}{2 \cosh k\gamma} e^{-ik\gamma v}, \quad \epsilon_{\text{af}}(v) := \tilde{A} \gamma \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-ik\gamma v}}{2 \cosh k\gamma}, \quad \tilde{A} = \frac{2J \sinh \gamma}{\gamma}.$$

量子転送行列の最大固有値は

$$\ln \Lambda_Q^{\max}(v) = \beta(\lambda_0 + \lambda_1 (\tilde{A} \partial_v)^{n-1}) \mathcal{E}_{\text{af}}(v) + \frac{1}{2\pi \tilde{A}} (\epsilon_{\text{af}} * \ln \mathfrak{B}[v] + \epsilon_{\text{af}} * \ln \bar{\mathfrak{B}}[v])\tag{B.23}$$

と表される. $\mathcal{E}_{\text{af}}(v)$ は

$$\mathcal{E}_{\text{af}}(v) = - \int_{-\pi/\gamma}^{\pi/\gamma} \epsilon_{\text{af}}(v-x) \tilde{a}_1(x) dx\tag{B.24}$$

であり, $\tilde{a}_1(v)$ は (A.28) 式で与えられる.

(iii) $\Delta > 1, J < 0$ (強磁性領域) の場合

最後に、反強磁性領域 $\Delta = \cosh \gamma > 1$ かつ $J < 0$ を考えよう。これは上の強磁性領域で $J \rightarrow -J$ としたものに他ならないが、このとき低温極限 $T \ll 1$ において $b, \bar{b} \gg 1$ となって扱いにくい。そこで $c(v) = \eta(v + 2i)$, $\bar{c}(v) = 1/\eta(v)$ とおけば、 $c(v)$ 及び $\bar{c}(v)$ は非線形積分方程式

$$\begin{aligned}\ln c(v) &= \beta \left\{ \lambda_0 + \lambda_1 (\tilde{A} \partial_v)^{n-1} \right\} \epsilon_f(v) + \text{const.} + \kappa_f * \ln \mathfrak{C}[v] - \kappa_f * \ln \bar{\mathfrak{C}}[v + 2i - \delta i], \\ \ln \bar{c}(v) &= \beta \left\{ \lambda_0 + \lambda_1 (\tilde{A} \partial_v)^{n-1} \right\} \bar{\epsilon}_f(v) - \text{const.} + \kappa_f * \ln \bar{\mathfrak{C}}[v] - \kappa_f * \ln \mathfrak{C}[v - 2i + \delta i], \\ \mathfrak{B}(v) &:= 1 + b(v); \quad \bar{\mathfrak{B}}(v) := 1 + \bar{b}(v)\end{aligned}\tag{B.25}$$

を満たす。ここで、 $*$ は前節と同じく、畳み込み $f * g[v] := \int_{-\pi/\gamma}^{\pi/\gamma} f(v-x)g(x)dx$ であり、また

$$\kappa_f(v) := -\frac{\gamma}{2\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{e^{-\gamma k} \cosh(ik\gamma v)}{\sinh k\gamma}, \quad \epsilon_f(v) := \frac{\tilde{A}\gamma}{2} \coth \frac{\gamma}{2}(1-iv), \quad \bar{\epsilon}_f(v) := \frac{\tilde{A}\gamma}{2} \coth \frac{\gamma}{2}(1+iv)$$

である。積分方程式中の定数 const. は補助条件

$$\frac{\gamma}{2\pi} \int_{-\pi/\gamma}^{\pi/\gamma} \ln \mathfrak{C}(x) dx - \frac{\gamma}{2\pi} \int_{-\pi/\gamma}^{\pi/\gamma} \ln \bar{\mathfrak{C}}(x) dx = \beta h$$

により決定される。特にゼロ磁場 $h = 0$ のとき $C = 0$ となる。 c, \bar{c} を通して $\Lambda_Q^{\max}(v)$ は

$$\ln \Lambda_Q^{\max}(v) = \frac{1}{2\pi A} (\bar{\epsilon}_f * \ln \mathfrak{B}[v] + \epsilon_f * \ln \bar{\mathfrak{B}}[v])\tag{B.26}$$

の形で表される。

参考文献

- [1] 例えば、高田康民: 「多体問題」 (朝倉書店, 1999).
- [2] 比較的最近の教科書として、例えば、T. Giamarchi: *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford Univ. Press, 2004). また、日本語で書かれた教科書として、例えば、川上則雄, 梁成吉: 「共形場理論と1次元量子系」 (岩波書店, 1997).
- [3] 線形応答理論一般に関して、例えば、GD. Mahan: *Many-Particle Physics* (Plenum, New York, 2000).
- [4] H. Castella, X. Zotos and P. Prelovšek: *Integrability and ideal conductance at finite temperatures*, Phys. Rev. Lett. **74** (1995) 972.
- [5] X. Zotos, F. Naef and P. Prelovšek: *Transport and conservation laws*, Phys. Rev. B **55** (1997) 11029.
- [6] B. N. Narozhny, A. J. Millis and N. Andrei: *Transport in the XXZ model*, Phys. Rev. B **58** (1998) R2921.
- [7] X. Zotos: *Finite temperature drude weight of the one-dimensional spin-1/2 Heisenberg model*, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 1764.

- [8] J. V. Alvarez and C. Gros: *Low-Temperature Transport in Heisenberg Chains*, Phys. Rev. Lett. **88** (2002) 077203.
- [9] S. Fujimoto and N. Kawakami: *Drude weight at finite temperatures for some nonintegrable quantum systems in one dimension*, Phys. Rev. Lett. **90** (2003) 197202.
- [10] A. Klümper and K. Sakai: *The thermal conductivity of the spin-1/2 XXZ chain at arbitrary temperature*, J. Phys. A **35** (2002) 2173.
- [11] K. Sakai and A. Klümper: *Non-dissipative thermal transport in the massive regimes of the XXZ chain*, J. Phys. A **36** (2003) 11617.
- [12] M. Takigawa, N. Motoyama, H. Eisaki and S. Uchida: *Dynamics in the $S = 1/2$ one-dimensional antiferromagnet Sr_2CuO_3 via ^{63}Cu NMR*, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 4612.
- [13] J. Kikuchi, N. Kurata, K. Motoya, T. Yamauchi and Y. Ueda: *Spin diffusion in the $S = 1/2$ quasi one-dimensional antiferromagnet $\alpha\text{-VO}(\text{PO}_3)_2$ via ^{31}P NMR*, J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 2765.
- [14] A. V. Sologubenko, E. Felder, K. Giannò, H. R. Ott, A. Vietkine and A. Revcolevschi: *Thermal conductivity and specific heat of the linear chain cuprate Sr_2CuO_3 : Evidence for thermal transport via spinons*, Phys. Rev. B **62** (2000) R6108.
- [15] A. V. Sologubenko, K. Giannò, H. R. Ott, A. Vietkine and A. Revcolevschi: *Heat transport by lattice and spin excitations in the spin-chain compounds SrCuO_2 and Sr_2CuO_3* , Phys. Rev. B **64** (2001) 054412.
- [16] A. V. Sologubenko, H. R. Ott, G. Dhalenne and A. Revcolevschi: *Universal behavior of spin-mediated energy transport in $S=1/2$ chain cuprates: $\text{BaCu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ as an example*, Europhys. Lett. **62** (2003) 540.
- [17] P. Ribeiroa, C. Hessb, P. Reutlera, G. Rothc and B. Büchnera: *Heat transport in doped SrCuO_2* , J. Mag. Mag. Mat. **290** (2005) 334.
- [18] P. Jung, R. W. Helmes and A. Rosch: *Transport in almost integrable models: Perturbed Heisenberg chains*, Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 067202.
- [19] S. Sachdev and K. Damle: *Low temperature spin diffusion in the one-dimensional quantum $O(3)$ nonlinear σ model*, Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 943.
- [20] K. Damle and S. Sachdev: *Spin dynamics and transport in gapped one-dimensional Heisenberg antiferromagnets at nonzero temperatures*, Phys. Rev. B **57** (1998) 8307.
- [21] S. Fujimoto: *Spin transport properties of the quantum one-dimensional non-linear sigma model: an application to Haldane gap systems*, J. Phys. Soc. Jpn. **68** (1999) 2810 .
- [22] S. Sachdev and K. Damle: *Comment on "spin transport properties of the quantum one-dimensional non-linear sigma model"*, J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 2712 .
- [23] S. Fujimoto: *Reply to comment on "spin transport properties of the quantum one-dimensional non-linear sigma model"*, J. Phys. Soc. Jpn. **69** (2000) 2714.
- [24] F. Heidrich-Meisner, A. Honecker, D. C. Cabra and W. Brenig: *Thermal conductivity of anisotropic and frustrated spin-1/2 chains*, Phys. Rev. B **66** (2002) 140406(R).
- [25] J. V. Alvarez and C. Gros: *Anomalous thermal conductivity of frustrated Heisenberg spin chains and ladders*, Phys. Rev. Lett. **89**, 156603 (2002).
- [26] E. Orignac, R. Chitra and R. Citro: *Thermal transport in one-dimensional spin gap systems*, Phys. Rev. B **67** (2003) 134426.

- [27] K. Saito and S. Miyashita: *Enhancement of the thermal conductivity in gapped quantum spin chains*, J. Phys. Soc. Jpn. **71** (2002) 2485.
- [28] K. Saito: *Transport anomaly in the low-energy regime of spin chains*, Phys. Rev. B **67**, 064410 (2003).
- [29] K. Saito: *Strong evidence of normal heat conduction in a one-dimensional quantum system*, Europhys. Lett. **61** (2003) 34.
- [30] F. Heidrich-Meisner, A. Honecker, D.C. Cabra and W. Brenig: *Zero-frequency transport properties of one-dimensional spin-1/2 systems*, Phys. Rev. B **68** (2003) 134436.
- [31] E. Shimshoni, N. Andrei and A. Rosch: *Thermal conductivity of spin-1/2 chains*, Phys. Rev. B **68** 104401 (2003).
- [32] K. Louis and C. Gros: *Quantum Monte Carlo simulation for the conductance of one-dimensional quantum spin systems*, Phys. Rev. B **68** (2003) 184424.
- [33] X. Zotos: *High temperature thermal conductivity of two-leg spin-1/2 ladders*, Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 067202.
- [34] J. Karadamoglou and X. Zotos: *Diffusive transport in spin-1 chains at high temperatures*, Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 177203.
- [35] A. N. Vasil'ev, V. V. Pryadun, D. I. Khomskii, G. Dhalenne, A. Revcolevschi, M. Isobe and Y. Ueda: *Anomalous thermal conductivity of NaV₂O₅ as compared to conventional spin-Peierls system CuGeO₃*, Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 1949.
- [36] Y. Ando, J. Takeya, D. L. Sisson, S. G. Doettinger, I. Tanaka, R. S. Feigelson and A. Kapitulnik: *Thermal conductivity of the spin-Peierls compound CuGeO₃*, Phys. Rev. B **58** (1998) R2913.
- [37] J. Takeya, I. Tsukada, Y. Ando, T. Masuda and K. Uchinokura: *Thermal conductivity of Mg-doped CuGeO₃ at very low temperatures: Heat conduction by antiferromagnetic magnons*, Phys. Rev. B **62** (2000) R9260.
- [38] J. Takeya, I. Tsukada, Y. Ando, I. Tanaka, R. S. Feigelson and A. Kapitulnik: *Thermal conductivity of pure and Mg-doped CuGeO₃ in the incommensurate phase*, Phys. Rev. B **63** (2001) 214407.
- [39] M. Hofmann, T. Lorenz, A. Freimuth, G. S. Uhrig, H. Kageyama, Y. Ueda, G. Dhalenne, A. Revcolevschi: *Heat transport in SrCu₂(BO₃)₂ and CuGeO₃*, Physica B **312-313** (2002) 597.
- [40] K. Kudo, S. Ishikawa, T. Noji, T. Adachi, Y. Koike, K. Maki, S. Tsuji and K. Kumagai: *Spin gap and hole pairing of Sr_{14-x}A_xCu₂₄O₄₁ (A = Ca and La) single crystals studied by the electrical resistivity and thermal conductivity*, J. Low Temp. Phys. **117** (1999) 1689.
- [41] A. V. Sologubenko, K. Giannò, H. R. Ott, U. Ammerahl and A. Revcolevschi: *Thermal conductivity of the hole-doped spin ladder system Sr_{14-x}Ca_xCu₂₄O₄₁*, Phys. Rev. Lett. **84** (2000) 2714.
- [42] C. Hess, C. Baumann, U. Ammerahl, B. Büchner, F. Heidrich-Meisner, W. Brenig and A. Revcolevschi: *Magnon heat transport in (Sr, Ca, La)₁₄Cu₂₄O₄₁*, Phys. Rev. B **64** (2001) 184305.
- [43] K. Kudo, S. Ishikawa, T. Noji, T. Adachi, Y. Koike, K. Maki, S. Tsuji and K. Kumagai: *Spin gap and hole pairing of Sr_{14-x}A_xCu₂₄O₄₁ (A = Ca and La) single crystals studied by the thermal conductivity*, J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001) 437.
- [44] C. Hessa, U. Ammerahl, C. Baumann, B. Büchner and A. Revcolevschi: *Magnon hole scattering in (Sr, Ca, La)₁₄Cu₂₄O₄₁*, Physica B **312-313** (2002) 612.

- [45] C. Hess, H. ElHaes, B. Büchner, U. Ammerahl, M. Hücker and A. Revcolevschi: *Magnon-Hole Scattering and Charge Order in $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$* , Phys. Rev. Lett. **93** (2004) 027005.
- [46] 例えば, 理論・実験両面から解説した学位論文として, F. Heidrich-Meisner: *Transport properties of low-dimensional quantum spin systems* (<http://www.digibib.tu-bs.de/?docid=00001712>). また, 最近のレビューとして, X. Zotos: *Issues on the transport of one dimensional quantum systems*, J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) Supp. 173. 1次元量子系のスピン伝導に関する解説として, 藤本聡: 「量子1次元系の有限温度における輸送現象-厳密解からのアプローチ-」日本物理学会誌 **57** (2002) 580. また, 低次元磁性体の熱伝導の実験に関するまとまった解説として, 工藤一貴, 小池洋二「低次元量子スピン系の熱伝導」固体物理 **38** (2003) 889.
- [47] K. Louis and C. Gros: *Diverging magnetothermal response in the one-dimensional Heisenberg chain*, Phys. Rev. B **67** (2003) 224410.
- [48] K. Sakai and A. Klümper: *Non-dissipative thermal transport and magnetothermal effect for the spin-1/2 Heisenberg chain*, J. Phys. Soc. Jpn **74** (2005) Suppl. 196.
- [49] S. Furukawa, D. Ikeda and K. Sakai: *Thermomagnetic power and figure of merit for spin-1/2 Heisenberg chain*, J. Phys. Soc. Jpn. **74** (2005) 3241.
- [50] M. Kohn: *Theory of the insulating state*, Phys. Rev. **133** (1964) A171.
- [51] M. Suzuki: *Ergodicity, constants of motion, and bounds for susceptibilities*, Physica **51** (1971) 277.
- [52] P. Mazur: *Non-ergodicity of phase functions in certain systems*, Physica **43** (1969) 533.
- [53] M. Takahashi: *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [54] M. Suzuki: *Relationship between d-dimensional quantal spin systems and (d+1)-dimensional Ising systems - Equivalence, critical exponents and systematic approximants of the partition function and spin correlations -*, Prog. Theor. Phys. **56** (1976) 1454.
- [55] I. Affleck: *Universal term in the free energy at a critical point and the conformal anomaly*, Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 746.
- [56] N.W. Ashcroft and D. Mermin: *Solid State Physics*, (Saunders, Philadelphia, 1976).
- [57] S. Fujimoto and N. Kawakami: *Exact Drude weight for the one-dimensional Hubbard model at finite temperatures*, J. Phys. A **31** (1998) 465.
- [58] A. Kuniba, K. Sakai and J. Suzuki: *Continued fraction TBA and functional relations in XXZ model at root of unity*, Nucl. Phys. B **525** (1998) 597.
- [59] ベーテ仮説と厳密解に関するまとまった日本語の解説として, 出口哲生: 「1次元量子系の厳密解とベーテ仮説の数理物理」物性研究 **74-3** (2000) p 255.
- [60] F.H.L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper and V.E. Korepin: *The one-dimensional Hubbard model*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
- [61] M. Suzuki and M. Inoue: *The ST-transformation approach to analytic solutions of quantum systems. I -General formulations and basic limit theorems-*, Prog. Theor. Phys. **78** (1987) 787.
- [62] J. Suzuki, Y. Akutsu and M. Wadati: *A new approach to quantum spin chains at finite temperature*, J. Phys. Soc. Jpn. **59** (1990) 2667.